

机器学习辅助金属材料力学性能预测

程洪,葛美伶,司天宇,张欢,何忠平*
(成都大学机械工程学院,四川 成都 610106)

摘要: 如今金属材料的发展进入了瓶颈期,急需一个新的发展方式来突破当前的瓶颈。上世纪50年代,人工智能逐渐兴起,经过60多年的发展,人工智能技术趋于成熟,大幅度的应用在各种领域中,材料领域也有所涉及。数据与人工智能结合的数据驱动方式成为改变金属材料发展瓶颈的新方式,有望大幅度提升金属材料的研发速度。介绍了金属材料领域的合金设计现状,在传统的“试错法”已经不能满足现有金属材料研发的基础上,综述了机器学习在金属材料力学性能预测等方面的一些应用。总结了机器学习存在的不足和需要优化的地方,展望了机器学习在金属材料领域中的发展方向。

关键词: 金属材料;机器学习;性能预测;合金设计;数据挖掘

中图分类号: TB302.6

文献标志码: A

文章编号: 1673-9981(2023)06-1070-08

引文格式: 程洪,葛美伶,司天宇,等. 机器学习辅助金属材料力学性能预测[J]. 材料研究与应用,2023,17(6):1070-1077.

CHENG Hong, GE Meiling, SI Tianyu, et al. Machine Learning-Assisted Prediction of Mechanical Properties of Metallic Materials[J]. Materials Research and Application, 2023, 17(6): 1070-1077.

0 引言

金属在人类日常生活中扮演着不可或缺的角色,贯穿着人们的衣食住行各个方面。随着社会的进步和科学技术的发展,人们对金属的需求不再仅仅是单纯的实用性要求,而是对性能卓越、具有广阔应用前景的多功能复合合金的追求^[1-3]。传统基于经验的“试错法”进行多功能复合合金研发,其所需的时间和成本庞大,而且实验结果也并不能完全达到预期目标^[4]。因此,需要探索一种新的方法,以加速多功能复合合金的研发。以最近关注频繁的高熵合金为例,高熵合金是最近兴起的热门材料,人们尚未对其进行深入研究,特别是高熵合金的复杂成分组成给材料设计和研发带来了难题。为了解决这些问题,需要探索新的方法来加速高熵合金的研发^[5]。自1956年诞生以来,人工智能(AI)已经发展成为一个经验丰富、热门的领域。机器学习(Machine Learning, ML)作为人工智能的一个分支,已经被应用于多个领域中,如材料工业。ML可以通过利用材料领域中的数据,在结构预测、催化剂设计和新材料发现等各种任务中发挥作用,同时也可以加速材料研发的进程、缩短研发周期、降低研发成本。

ML的应用有助于推动材料科学和工程的发展,其与材料研发相结合是未来研究和一个

有前途的方向,可高效快速地研发出更加高效、经济和高性能的材料。本综述通过机器学习与金属材料结合的具体案例,展现机器学习方法在金属材料领域中的重要作用,这种新兴的交叉学科展现出了不可估量的潜力。

1 材料领域中的机器学习应用简介

ML的目标是通过挖掘数据之间的隐藏关系来发掘数据的潜在价值,帮助研究人员分析成分或加工过程之间的关联性,从而揭示材料的性质和行为。与传统的试错方法相比,这种方式可以大大地缩短研究人员的研发时间,提高材料研发的效率。因此,ML在材料科学和工程领域中的应用具有重要的意义,可以为人们提供更加高效和可靠的材料研发解决方案。

图1为机器学习的算法分类。从图1可见,ML算法主要分为监督学习和无监督学习。监督学习是指在给定已知数据集的情况下,该数据集中已有正确的结果和标签,通过对数据集的学习得到一个结果,然后将结果与给定的正确结果进行对比验证的方法,通常被用于分类或回归问题。Oh等^[6]利用神经网络回归模型,使用热处理(830—920℃)Ti-4Al-2Fe-xMn($x=0\%—4\%$)合金的30组实验拉

收稿日期:2023-03-25

作者简介:程洪,硕士研究生,研究方向为基于机器学习的高强合金设计,E-mail: 15681369361@163.com。

通信作者:何忠平,博士,副研究员,研究方向为金属材料、机器学习,E-mail: 287785036@qq.com。

伸数据集进行训练,进一步生成400组拉伸数据集成分和温度区间,找到未在数据集中出现的883℃下热处理的Ti-4Al-2Fe-1.4Mn合金,该合金具有超高比强度($289 \text{ MPa} \cdot \text{cm}^3 \cdot \text{g}^{-1}$)和高伸长率(34%),借助ML算法成功地开发了一种新合金。无监督学习是指在给定数据集,但不会给定结果和标签,使用算法将数据集划分为特征相似的子集的方法。王佳豪

等^[7]使用层次聚类 and LASSO 回归方法,将79种工模具钢的成分和硬度数据集分成了4类,并使用LASSO回归方法成功地预测了工模具钢的硬度。不同的机器学习方法,具体的使用场景也不同。以回归方法为例,对于同一个问题,需要使用不同的方法来进行预测,然后对各种方法进行评分,得分最高的方法就选择用来解决此问题。

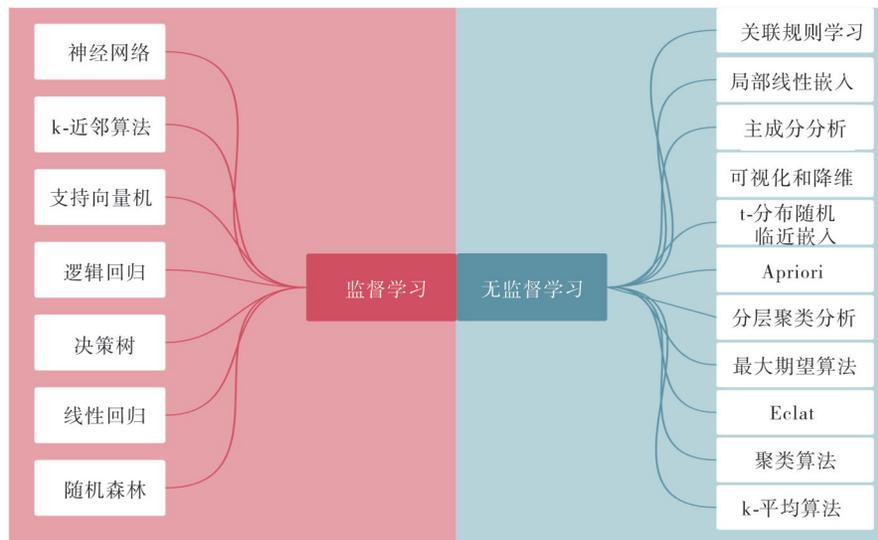


图1 机器学习的算法分类

Figure 1 Algorithm classification of machine learning

图2为ML构建的流程示意图。从图2可见,ML构建包含3个阶段。样本构建过程涵盖了数据预处理和特征工程两个步骤,数据预处理阶段用于对收集到的数据进行清洗和转换,而特征工程则包括特征提取、特征选择、特征构建和特征学习,用于从样本中选取适当的属性值或特征,以此为基础划分数据子集,进一步观察数据之间的相

关性;模型构建阶段涉及选择不同的算法构建模型,也可以使用多个算法组合形成一个模型,在此过程中可以选择合适的算法对模型进行优化,如使用梯度下降算法等,以进一步提高模型的准确性;模型评估是对所选择的模型进行评估,这是一个重要的阶段,用于评估所选模型的性能,以提供一个评判标准。

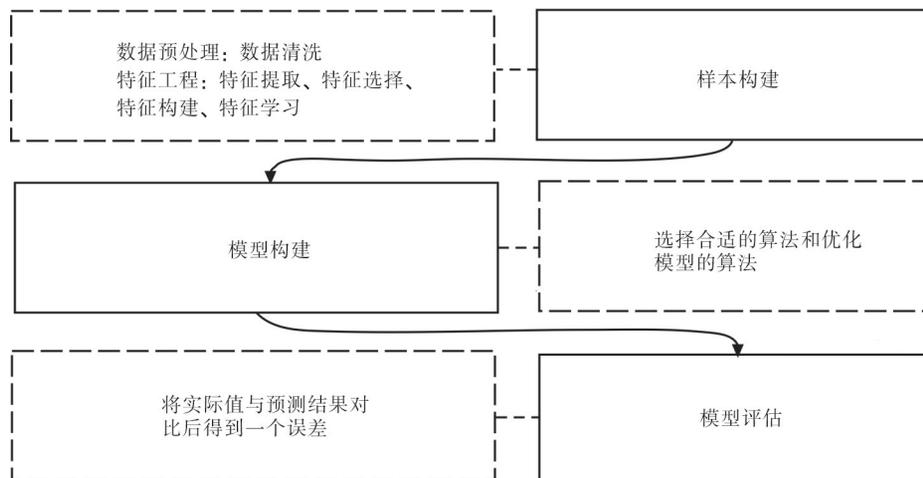


图2 机器学习的构建流程

Figure 2 Construction process of machine learning

图3为一个ML的完整工作流程示意图。近年来,ML在材料科学和材料力学中的应用越来越受到关注。ML技术可以利用海量的实验数据,预测

材料性能并优化材料设计,同时还可以加速材料开发过程、降低研究成本。

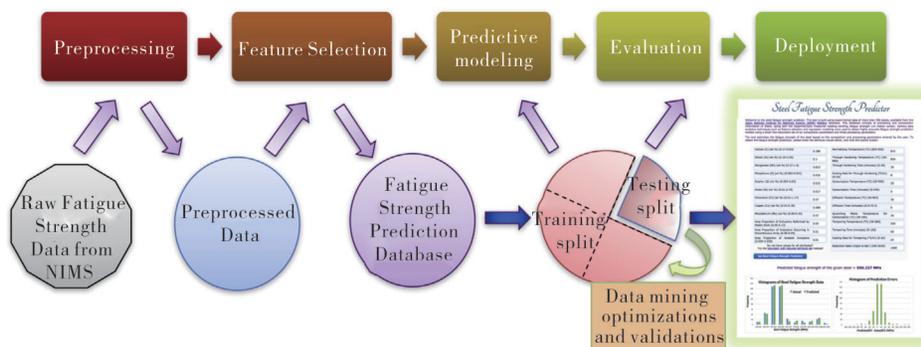


图3 机器学习一个完整的工作过程^[8]

Figure 3 A Complete Working Process of Machine Learning

在材料科学中,ML被广泛应用于材料性能预测和优化设计^[9-18]。传统的材料性能预测方法依赖于经验公式和理论模型,这些方法受限于对材料性质的理解和对其复杂结构的建模。相比之下,ML模型可以利用大量的实验数据和ML算法,预测材料性能并识别与其相关的结构特征。白冰等^[19]获得了ML模型优化后的ODS合金关键成分分配比,预测出的合金抗拉强度均在1 400 MPa以上,这为快堆结构材料的优化设计提供了技术支持。ML的预测结果可以为材料设计提供重要的指导,如指导设计新材料的化学成分和微观结构,以实现期望的性能。在材料力学领域中,ML也被应用于优化材料加工工艺,以改善材料的力学性能。ML可以通过建立材料加工工艺与材料性能之间的关联,提高材料的性能并降低成本。例如,通过使用ML算法优化材料的热处理和形变条件,以实现所需的力学性能。Lee等^[20]构建增强决策树回归模型来预测中锰钢的化学成分及制造工艺和机械性能之间的关系,并根据模型设计的化学成分和制造工艺条件制造候选钢材,得到了极限抗拉强度(UTS)为1 952 MPa的高强度钢。此外,ML还可以用于材料断裂和疲劳行为的预测和分析,帮助研究人员更好地理解材料的力学行为,进而实现对材料性能的优化。

ML方法不仅为数据采集和分析提供了极大的便利,而且还建立了基本物理参数和力学性能之间的相关性,以此来辅助材料的研发和优化^[21-22]。

2 机器学习对辅助金属材料的力学性能预测

机器学习是通过发现数据中潜在规律的一种计算方法,该法可以进行未来预测,而无需任何主动的

人类干预(在理论上)。2011年6月,美国政府启动了材料基因组计划(MGI)^[23],以实现发展经济安全和人类福祉所必需的先进材料的愿景,该计划描述了一个材料创新基础设施,包括先进的计算、实验和数据信息学工具,使先进材料的发现、开发、制造和部署速度至少提高1倍,而成本仅为目前的一小部分。随着材料基因组计划、高度复杂的数据库管理系统(DBMS)的出现,以及机器学习算法和计算能力的前所未有的进步,机器学习已经实现了高度准确和快速预测的模型开发,这些模型正在加速各种应用的优质材料的识别和后续的部署。本文主要以文献中机器学习在金属材料力学性能预测方面成功应用案例为主,综述了机器学习在材料力学性能方面相对于传统实验的研究优势和对材料性能的优化。

2.1 机器学习对金属材料疲劳寿命的预测

疲劳寿命是指材料在特定环境下从使用到失效所经历的寿命。为了测试材料的可靠性和安全性,通常需要在不同的生产环境下对其疲劳寿命进行测量。然而,进行大量的疲劳试验,特别是高周疲劳试验,需要耗费大量时间和成本。以前的研究者通常依靠领域经验和基于物理的复杂模型来理解过去几十年中的因果关系,这导致实验测试的代价非常高。为了降低制备和实验的时间和成本,需要一种有效和高效的方法来生成、管理和利用现有数据,以显著加速疲劳寿命预测。机器学习方法基于以往从文献中获得的数据来预测特定材料组合的疲劳寿命,这是一种很有前途的方法。近年来,数据驱动的机器学习方法已成功应用于材料疲劳研究^[24-25],用机器学习模拟来代替传统的实验研究,得到了非常不错

的研究成果。Agrawal等^[8]引用NIMS公开实验数据库的数据,着重分别在成分和处理方法上,以及两个合并在一起对钢的疲劳强度的影响,采用了40余种机器学习模型来分别对数据进行模拟训练,并采用相关特征方法进行特征选取,采用交叉验证方法进行验证,最后将得出的结果进行一个排列并且对比,得出结果后找出了其中的最佳预测模型,用来指导未来的设计工作。Lian等^[26]结合经验公式和数据驱动模型来预测7种不同系列的铝合金疲劳寿命,构建了梯度提升回归机器学习模型,对7个不同系列铝合金的疲劳寿命进行了预测,平均相对误差为140%,较基线模型有较大提高。实验结果成功地证明,经验公式和机器学习结合的优点,为疲劳寿命预测提供了一种通用的方法,从而缩短了实验时间和降低了成本。

通过机器学习技术,还可以发现影响材料疲劳寿命的关键因素。Zhou等^[27]从许多可能影响疲劳寿命的特征中确定了5个遗传特征。Luo等^[28]通过机器学习方法,揭示了一系列基于孔隙的特征对Inconel 718疲劳寿命的影响。Bao等^[24]发现,Ti-6Al-4V合金的疲劳寿命主要由临界缺陷的几何特征决定。这些实例研究为材料的疲劳寿命预测取得了一定的成果。

2.2 机器学习对金属材料硬度的预测

发现新材料一直是一个具有挑战性的任务,而试错法仍然是最常用的方法之一。为了避免制造和实验循环所需的时间和成本,需要一种有效且高效的方法来生成、管理和利用现有数据,以显著加速新材料的发现。利用机器学习方法来预测特定材料组合的特性,可以基于以前从文献中获取的数据。机器学习被成功地应用于功能材料和先进材料中,以探索具有所需性能的新材料组合^[29-33],机器学习框架可以通过关联不同特征和目标属性的相互依赖性来避免耗时的撞击和试验周期,并且成功地加快材料的发现。Masood Chaudry等^[34]从文献中收集Al-Cu-X(X:Zn, Zr等)合金的成分、时效条件(时间和温度)、重要的物理和化学性能及硬度等数据,采用各种机器学习技术来加速铝合金的性能改进设计,以及训练机器学习算法预测高硬度铝合金,通过预测不同时效硬化条件下的铝合金的硬度时,证明了所构建模型的预测精度。Chang等^[10]利用神经网络来预测基于非等摩尔AlCoCrFeMnNi的高熵合金(HEAs)的组成,以达到预测该体系中最高硬度。

不可否认,机器学习可以大大地减少探索新材

料所需的实验和计算次数,并缩短先进材料的开发周期。机器学习可以有效地探索未知的成分空间, Yang等^[18]为了改善传统试错方法的局限性,提出一种基于机器学习的合金设计系统(MADS),以便快速提高HEAs的硬度,高效地发现具有优异性能的HEAs。

2.3 机器学习对金属材料屈服强度的预测

测量高温屈服强度的实验相当昂贵、复杂且耗时。然而,机器学习的应用主要目的之一是用于替代传统实验,从而减少实验次数,其不仅可以完全替代实验过程,还可以替代某些复杂情况下实验计算的某些部分。Du等^[35]采用实验仪器分析了工艺参数对超细晶Fe-C合金力学性能的影响,通过优化一种传统的反向传播神经网络(BP)结构,得出最佳模型,结果表明BP神经网络在Fe-C超细晶合金力学性能预测方面和其它模型相比,其有很好的优越性,误差仅为4.47%。Ozerdem等^[36]利用梯度下降学习算法的反向传播神经网络,以C、Si、Mn含量(质量分数)为输入,以抗拉强度、屈服强度、伸长率、面积收缩率、硬度为输出,对ANN系统进行训练,通过该模型给定的条件成功地预测了热轧非结果化AISI 10xx系列碳素钢的力学性能。

合金制备过程需要仔细考虑设计成本、复杂性和合成时间,以避免获得不理想的力学性能的机会。在进行试错实验之前,需要一种替代的计算机模拟方法来预测HEAs在高温下的屈服强度。Bhandari等^[37]首次采用基于随机森林(RF)技术的机器学习方法,对高熵合金MoNbTaTiW和HfMoNbTaTiZr在800和1200℃下的屈服强度,使用RF回归器模型进行预测,预测结果与实验报告一致,表明RF回归器模型预测HEAs在所需温度下的屈服强度具有较高的准确性。

2.4 机器学习对金属材料拉伸性能的预测

为了清楚地了解影响材料的抗拉性能的因素,通常需要进行大量的试错开发和研究,因为材料的抗拉强度往往是由多个元素共同决定的。然而,通过更复杂的实验和全面的物理理论计算来建立模型往往是昂贵且耗时的。因此,为了减少制备和实验的时间和成本,需要建立和发展拉伸性能预测的计算模型。机器学习是一种很有前途的方法,其可以通过足够的数据和规则发现算法,使计算机能够在没有人工输入的情况下确定所有潜在的物理定律。Xu等^[38]利用神经网络(ANN)和支持向量机(SVM)算法,建立两个模型,两种模型在预测屈服

强度(YS)、极限抗拉强度(UTS)和拉伸伸长率(EL)方面都取得了较好的准确性。Mamun等^[39]为了能够设计一种使用寿命较长的高强度钢,使用梯度提升机策划的实验数据集对9-12Cr FMA和奥氏体不锈钢的蠕变断裂强度进行参数化,并且完成交叉验证,在相关系数方面取得了较高的预测性能,无需进行额外的综合拉伸试验或物理理论计算。Wang等^[40]为了克服传统物理冶金模型的局限性,将特征选取方法与机器学习相结合,用于选取高度相关特征,采用机器学习算法建立了RAFM钢屈服强度和总伸长率预测的通用模型,与传统方法相比,其更具有准确性和通用性。该预测方式在工业上也有应用,Jiang等^[41]为了减少珠光体钢丝制造过程产生的不利影响,用一种将机器学习与多尺度计算相结合的新策略,来建立基于高维、小尺度工业数据集的抗拉强度模型,替代昂贵、耗时的实验或物理理论计算。

2.5 机器学习对金属材料力学性能的优化

机器学习不仅可用于材料力学性能的预测,还可用于优化和提高材料性能。机器学习可取代冗长的实验设计,降低成本。最近几年,机器学习方法越来越多地应用于各种铝合金的设计中,以改善其力学性能和使用性能^[42-44,34]。Chen等^[11]制定了主动学习策略来执行材料性能的多目标优化,主动学习策略由多目标的机器学习预测,通过将一组目标标量化为单个目标的有效采样及实验反馈组成。快速优化两步时效处理参数来验证设计策略,以提高铸态ZE62(Mg-6%, Zn-2%)镁合金。

一个金属材料包含多种因素,例如材料的成分、结构、显微组织和缺陷等。材料的性能是由以上的条件共同耦合决定,几乎没有受单一因素的影响。所以,想要通过实验来研究多种条件对材料的影响非常困难。使用机器学习则可以很好地解决这个问题,能更好的找到各种参数条件和性能之间的潜在关系。Bai等^[9]利用机器学习方法建立ODS合金的关键成分与拉伸性能之间的关系,通过二者之间的相关性,得到了更高强度和延性的ODS合金的成分优化配比。

Oh等^[45]建立TRIP钛合金组成-加工-性能关系的神经网络模型,对Ti-4Al-2Fe-xMn合金在不同高温下的UTS和EI值进行了预测,利用基于ANN和TPS插值方法的等高线图,根据Mn含量和HT温度预测UTS和EI值,得到了该合金的优异力学性能。Li等^[16]用基于机器学习的合成和工艺优化方法研究了Al-Zn-Mg-Cu合金体系(7xxx系列),优化后的合金具有较好的成分,使得在原有的合金基础上性能有了进一步提升。Dey等^[12]通过多目标优化,利用遗传算法设计合金,解决了增加强度和延性目标冲突的问题,设计出了具有优越性能的铝合金。

3 机器学习的评价

3.1 机器学习的不足

机器学习固然为金属材料的研究开发上提供了一个巨大的帮助,使得材料研发速度有了一个巨大的提升。但是,任何东西都是存在着缺陷的,机器学习也不例外。表1列出了关于机器学习的一些缺陷。

表1 机器学习的缺陷总结

Table 1 Summary of Machine Learning Defects

不足	描述
数据不足	在大多数研究中,研究数据是通过有限的实验条件获得的,同时需要很长时间,要获得大量的实验数据很困难。
特征难以分辨	材料研究过程,重点是探索材料四要素之间的相互关系。但是,随着实验中的不同噪音,会产生许多无用处的干扰元素,这些元素会增加机器学习的精准度。另外,在处理特征时,需要找出最具影响力的特征,或者是关联度最高的特征,这些都需要去尝试多种策略才能实现。
抽象模型可解释性差	在材料科学领域,机器学习一直被视为“黑匣子”,模型的内部工作机制是复杂的,大多数研究都忽略了数据驱动背后的原理,而只注重于实验结果。对于严格的材料研究,在这种情况下性能的预测可能不太可信。
机器学习算法通用性差	每个机器学习模型都是针对某种材料或者某种功能独立开发,除此以外难以使用在其它的场景。

从表1可以看出,机器学习虽对金属材料力学性能预测有很好地效果,但是表中条件得不到满足而使得到的预测结果往往会很差,所以针对表中的情况,需要尽量的完善这些条件。

3.2 机器学习的优化

除了增加数据量以提高准确性以外,对于一个良好的机器学习模型,还可以通过优化算法以增大数据集的数量。例如:可以通过交叉验证法,在小样

本数据集上得出扩大训练集样本数量,进一步提高精度;在机器学习的算法上进行改进也是可行的,尝试不同的算法或结合2种以上的算法,以提高一定的准确性。

材料研究领域中存在诸多不确定的参数,如温度、湿度和时间,这些参数会影响最终材料的组成和形态,传统机器学习在处理相关特征方面也存在局限性。因此,为了提高预测性能,应该对这些可变参数进行预处理,尽可能选择可解释的模型,如逻辑回归、线性回归模型等。此外,通过不断尝试多种特征选择方法来去除噪音,选择与目标值关联度高的特征,也可以提高精度。调试机器学习的超参数也是一个有效地方法,对特定的超参数进行调整也可以使模型的输出结果得到提升。

4 展望

最近几年,机器学习与材料结合的成功案例越来越多,尤其是金属材料,以材料实验数据为基础的机器学习在材料领域的研究取得了非常显著的成果,这也说明了机器学习在辅助材料方面展现出了巨大的潜力^[46]。机器学习已经展示了在预测和优化材料力学性能方面的巨大潜力,未来期待机器学习在新材料的设计和开发中发挥关键作用。

(1)需要开发更先进的机器学习算法,以更好地捕捉材料结构和性能之间的复杂关系。这将需要整合不同类型的数据,如化学组成、微观结构特征和加工条件。此外,可以探索新的数据驱动方法,如深度学习和基于图形的方法,以从材料数据中提取更有意义和可解释的特征。

(2)可以利用机器学习来优化金属材料加工参数,如热处理和变形条件,以实现所需的力学性能。通过使用优化算法,如贝叶斯优化和遗传算法,寻找最佳加工条件,以最大化特定力学性能。

(3)可以将机器学习与多尺度建模相结合,以提供对金属材料力学行为的更全面理解。通过将原子模拟、中等尺度模型、连续力学与机器学习模型相结合,以精确预测多个长度尺度上金属材料的力学性能。

(4)将机器学习与材料科学和工程相结合,可加速开发具有理想力学性能的高性能材料的巨大潜力。材料科学和工程的未来在于将实验数据和机器学习模型结合起来,创造更高效和成本效益的材料设计和开发方法。

5 结语

综述了当前金属材料科学领域的发展现状,并

介绍了机器学习在该领域中的应用。尽管机器学习方法存在一定不足,但其对于金属材料性能预测和优化的应用已经取得了一定的成功。因此,金属材料领域的研究人员应该加强专业知识积累,不仅要掌握以数据为驱动的机器学习方法,更要理解其原理。只有这样,才能够更好地利用材料数据的机器学习方法来加速预测和研发,从而推动金属材料智能化的发展。未来,机器学习可能成为材料科学领域的重要研究方向之一。

参考文献:

- [1] 杨浩坤,黎伟华.三种汽车用轻量化材料的研究进展[J].材料研究与应用,2022(3):16.
- [2] 周晓璐,李伟,张帅,等.生物医用多孔钛及钛合金制备技术的研究现状[J].材料研究与应用,2015,9(1):5.
- [3] 周成,叶其斌,田勇,等.超高强度结构钢的研究及发展[J].材料热处理学报,2021,42(1):10.
- [4] 刘莲花,肖永通.几种金属材料弯曲性能试验方法的对比[J].材料研究与应用,2021(3):306
- [5] 赵鼎祺,乔珺威,吴玉程.机器学习辅助高熵合金设计的研究进展[J].中国材料进展,2021,40(7):10.
- [6] OH J M, NARAYANA P L, HONG J K, et al. Property optimization of TRIP Ti alloys based on artificial neural network [J]. Journal of Alloys and Compounds, 2021, 884: 161029.
- [7] 王家豪,孙升,何燕霖,等.基于机器学习的工模具钢硬度预测[J].中国科学:技术科学,2019,49(10):11.
- [8] AGRAWAL A, CHOUDHARY A. An online tool for predicting fatigue strength of steel alloys based on ensemble data mining [J]. International Journal of Fatigue, 2018, 113: 389-400.
- [9] BAI B, HAN X, ZHENG Q, et al. Composition optimization of high strength and ductility ODS alloy based on machine learning[J]. Fusion Engineering and Design, 2020, 161: 111939.
- [10] CHANG Y J, JUI C Y, LEE W J, et al. Prediction of the composition and hardness of high-entropy alloys by machine learning[J]. JOM, 2019, 71(10): 3433-3442.
- [11] CHEN Y, TIAN Y, ZHOU Y, et al. Machine learning assisted multi-objective optimization for materials processing parameters: A case study in Mg alloy [J]. Journal of Alloys and Compounds, 2020, 844: 156159.
- [12] DEY S, SULTANA N, DEY P, et al. Intelligent design optimization of age-hardenable Al alloys [J]. Computational Materials Science, 2018, 153: 315-325.
- [13] DEY S, SULTANA N, KAISER M S, et al. Computational intelligence based design of age-

- hardenable aluminium alloys for different temperature regimes[J]. *Materials & Design*, 2016, 92: 522-534.
- [14] GUO Z, SHA W. Modelling the correlation between processing parameters and properties of maraging steels using artificial neural network [J]. *Computational Materials Science*, 2004, 29(1): 12-28.
- [15] KWAK S, KIM J, DING H, et al. Machine learning prediction of the mechanical properties of γ -TiAl alloys produced using random forest regression model [J]. *Journal of Materials Research and Technology*, 2022; S2238785422002800.
- [16] LI X, ROTH C C, MOHR D. Machine-learning based temperature- and rate-dependent plasticity model: Application to analysis of fracture experiments on DP steel [J]. *International Journal of Plasticity*, 2019, 118: 320-344.
- [17] ZHAO F, LEI C, ZHAO Q, et al. Predicting the property contour-map and optimum composition of Cu-Co-Si alloys via machine learning[J]. *Materials Today Communications*, 2022, 30: 103138.
- [18] YANG C, REN C, JIA Y, et al. A machine learning-based alloy design system to facilitate the rational design of high entropy alloys with enhanced hardness [J]. *Acta Materialia*, 2022, 222: 117431.
- [19] 白冰, 郑全, 任帅, 等. 基于机器学习的高强度 ODS 合金成分设计[J]. *原子能科学技术*, 2020, 54(4): 5.
- [20] LEE J Y, KIM M, LEE Y K. Design of high strength medium-Mn steel using machine learning[J]. *Materials Science and Engineering: A*, 2022, 843: 143148.
- [21] KALININ S V, SUMPTER B G, ARCHIBALD R K. Big-deep-smart data in imaging for guiding materials design[J]. *Nature Materials*, 2015, 14(10): 973-980.
- [22] JORDAN M I, MITCHELL T M. Machine learning: Trends, perspectives, and prospects [J]. *Science*, 2015, 349(6245): 255-260.
- [23] PAUL A, ACAR P, LIU R, et al. Data sampling schemes for microstructure design with vibrational tuning constraints[J]. *AIAA Journal*, 2018, 56(3): 1239-1250.
- [24] BAO H, WU S, WU Z, et al. A machine-learning fatigue life prediction approach of additively manufactured metals [J]. *Engineering Fracture Mechanics*, 2021, 242: 107508.
- [25] HE L, WANG Z, AKEBONO H, et al. Machine learning-based predictions of fatigue life and fatigue limit for steels [J]. *Journal of Materials Science & Technology*, 2021, 90: 9-19.
- [26] LIAN Z, LI M, LU W. Fatigue life prediction of aluminum alloy via knowledge-based machine learning [J]. *International Journal of Fatigue*, 2022, 157: 106716.
- [27] ZHOU K, SUN X, SHI S, et al. Machine learning-based genetic feature identification and fatigue life prediction [J]. *Fatigue & Fracture of Engineering Materials & Structures*, 2021, 44(9): 2524-2537.
- [28] LUO Y W, ZHANG B, FENG X, et al. Pore-affected fatigue life scattering and prediction of additively manufactured Inconel 718: An investigation based on miniature specimen testing and machine learning approach [J]. *Materials Science and Engineering: A*, 2021, 802: 140693.
- [29] ORME A D, CHELLADURAI I, RAMPTON T M, et al. Insights into twinning in Mg AZ31: A combined EBSD and machine learning study [J]. *Computational Materials Science*, 2016, 124: 353-363.
- [30] PEI Z, YIN J. Machine learning as a contributor to physics: Understanding Mg alloys [J]. *Materials & Design*, 2019, 172: 107759.
- [31] XUE D, XUE D, YUAN R, et al. An informatics approach to transformation temperatures of NiTi-based shape memory alloys[J]. *Acta Materialia*, 2017, 125: 532-541.
- [32] LIU Y, GUO B, ZOU X, et al. Machine learning assisted materials design and discovery for rechargeable batteries [J]. *Energy Storage Materials*, 2020, 31: 434-450.
- [33] ROTER B, DORDEVIC S V. Predicting new superconductors and their critical temperatures using unsupervised machine learning [J]. *Physica C: Superconductivity and its Applications*, 2020, 575: 1353689.
- [34] MASOOD CHAUDRY U, HAMAD K, ABUHMED T. Machine learning-aided design of aluminum alloys with high performance [J]. *Materials Today Communications*, 2021, 26: 101897.
- [35] DU J L, FENG Y L, ZHANG M. Construction of a machine-learning-based prediction model for mechanical properties of ultra-fine-grained Fe-C alloy [J]. *Journal of Materials Research and Technology*, 2021, 15: 4914-4930.
- [36] OZERDEM M S, KOLUKISA S. Artificial neural network approach to predict mechanical properties of hot rolled, nonresulfurized, AISI 10xx series carbon steel bars [J]. *Journal of Materials Processing Technology*, 2008, 199(1-3): 437-439.
- [37] BHANDARI U, RAFI Md R, ZHANG C, et al. Yield strength prediction of high-entropy alloys using machine learning [J]. *Materials Today Communications*, 2021, 26: 101871.
- [38] XU X, WANG L, ZHU G, et al. Predicting tensile

- properties of AZ31 magnesium alloys by machine learning[J]. JOM, 2020, 72(11): 3935-3942.
- [39] MAMUN O, WENZLICK M, SATHANUR A, et al. Machine learning augmented predictive and generative model for rupture life in ferritic and austenitic steels [J]. Materials Degradation, 2021, 5(1): 20.
- [40] WANG C, SHEN C, CUI Q, et al. Tensile property prediction by feature engineering guided machine learning in reduced activation ferritic/martensitic steels [J]. Journal of Nuclear Materials, 2020, 529: 151823.
- [41] JIANG X, JIA B, ZHANG G, et al. A strategy combining machine learning and multiscale calculation to predict tensile strength for pearlitic steel wires with industrial data [J]. Scripta Materialia, 2020, 186: 272-277.
- [42] HU Y, XIE J, LIU Z, et al. CA method with machine learning for simulating the grain and pore growth of aluminum alloys[J]. Computational Materials Science, 2018, 142: 244-254.
- [43] SINGH A K, SINGHAL D, KUMAR R. Machining of aluminum 7075 alloy using EDM process: An ANN validation [J]. Materials Today: Proceedings, 2020, 26: 2839-2844.
- [44] PAN S, WANG Y, YU J, et al. Accelerated discovery of high-performance Cu-Ni-Co-Si alloys through machine learning [J]. Materials & Design, 2021, 209: 109929.
- [45] OH J M, NARAYANA P L, HONG J K, et al. Property optimization of TRIP Ti alloys based on artificial neural network [J]. Journal of Alloys and Compounds, 2021, 884: 161029.
- [46] SCHMIDT J, MARQUES M R G, BOTTI S, et al. Recent advances and applications of machine learning in solid-state materials science [J]. Computational Materials, 2019, 5(1): 83.

Machine Learning-Assisted Prediction of Mechanical Properties of Metallic Materials

CHENG Hong, GE Meiling, SI Tianyu, ZHANG Huan, HE Zongping*
(College of Mechanical Engineering, Chengdu University, Chengdu 610106, China)

Abstract: Nowadays, the development of metal materials has entered a bottleneck, and a new way of development is urgently needed to break through the current bottleneck. Artificial intelligence gradually emerged in the 1950s, and after more than 60 years of development, AI technology has matured and has been substantially applied in various fields, including the field of materials. The data-driven approach combining data and AI has become a new way to change the development bottleneck of metal materials, which is expected to significantly increase the speed of metal materials research and development. This paper introduces the current situation of alloy design in the field of metal materials. Given that traditional "trial-and-error" methods can no longer meet the requirements of current metal material research and development, it summarizes some applications of machine learning in predicting mechanical properties of metal materials. It also summarizes the shortcomings of machine learning and areas that need optimization, and finally provides prospects for the development of machine learning in the field of metal materials.

Keywords: metallic materials; machine learning; property prediction; alloy design; data mining

(学术编辑:黎小辉)