



## 机器学习在镁合金应用中的研究进展

吴铮 李全安 陈晓亚 郑泽宇 张娜娜 王政

### Applications of machine learning on magnesium alloys

WU Zheng, LI Quanan, CHEN Xiaoya, ZHENG Zeyu, ZHANG Nana, WANG Zheng

引用本文:

吴铮, 李全安, 陈晓亚, 郑泽宇, 张娜娜, 王政. 机器学习在镁合金应用中的研究进展[J]. 北科大: 工程科学学报, 2024, 46(10): 1797–1811. doi: 10.13374/j.issn2095–9389.2024.03.10.002

WU Zheng, LI Quanan, CHEN Xiaoya, ZHENG Zeyu, ZHANG Nana, WANG Zheng. Applications of machine learning on magnesium alloys[J]. *Chinese Journal of Engineering*, 2024, 46(10): 1797–1811. doi: 10.13374/j.issn2095–9389.2024.03.10.002

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.13374/j.issn2095–9389.2024.03.10.002>

## 您可能感兴趣的其他文章

### Articles you may be interested in

#### 机器学习在非晶合金开发中的应用

Machine learning in designing amorphous alloys

工程科学学报. 2023, 45(9): 1517 <https://doi.org/10.13374/j.issn2095–9389.2022.11.11.002>

#### 机器学习在金属材料服役性能预测中的应用

Application of machine learning for predicting the service performance of metallic materials

工程科学学报. 2024, 46(1): 120 <https://doi.org/10.13374/j.issn2095–9389.2023.03.07.002>

#### 专家知识增强的机器学习建模在高强高导铜合金开发中的应用

Application of expert–augmented machine learning modeling in high–strength and high–conductivity copper alloy development

工程科学学报. 2023, 45(11): 1908 <https://doi.org/10.13374/j.issn2095–9389.2022.09.19.002>

#### 基于机器学习的材料弹性性能预测及可视化分析

Prediction of the elastic properties of materials based on machine learning and visualization analysis

工程科学学报. 2024, 46(6): 1120 <https://doi.org/10.13374/j.issn2095–9389.2023.08.10.003>

#### 机器学习在深冲钢质量自动判级中的应用

Application of machine learning in automatic discrimination of product quality of deep drawn steel

工程科学学报. 2022, 44(6): 1062 <https://doi.org/10.13374/j.issn2095–9389.2021.05.08.002>

#### 深度学习在炼钢过程中的研究进展及应用现状

Research progress and application status of deep learning in steelmaking process

工程科学学报. 2022, 44(7): 1171 <https://doi.org/10.13374/j.issn2095–9389.2021.08.17.001>

# 机器学习在镁合金应用中的研究进展

吴 铮<sup>1)</sup>, 李全安<sup>1,2,3)✉</sup>, 陈晓亚<sup>1,2)</sup>, 郑泽宇<sup>1)</sup>, 张娜娜<sup>1)</sup>, 王 政<sup>4)</sup>

1) 河南科技大学材料科学与工程学院, 洛阳 471023 2) 有色金属新材料与先进加工技术省部共建协同创新中心, 洛阳 471023 3) 龙门实验室, 洛阳 471000 4) 郑州大学计算机与人工智能学院, 郑州 450000

✉通信作者, E-mail: [qali@haust.edu.cn](mailto:qali@haust.edu.cn)

**摘 要** 在材料基因工程的背景下, 基于数据驱动的机器学习技术作为一种强大的新型工具在镁合金的研究领域得到了广泛的关注。机器学习可以绕过几乎任何复杂的实验过程, 只要确定描述符和目标属性之间的联系, 就能以较低的成本, 快捷地预测材料的性能。传统的实验试错法和基于密度泛函理论的方法由于时间成本高、效率低, 难以满足材料科学的不断发展需求。本文综述了机器学习在镁合金应用中的研究进展。首先简述了机器学习的基本流程和各种方法, 主要包括数据集收集、数据预处理、模型构建和性能评估, 并对机器学习算法的分类进行了总结。重点介绍了机器学习在镁合金加工工艺、显微组织、力学性能、耐蚀性能、储氢性能、固有属性(强化机制、各向异性等)和逆向设计等诸多方面应用的研究成就。机器学习模型不仅加速了新型高性能镁合金的设计过程, 而且推动了镁合金塑性变形机理的深入研究。最后, 分析了机器学习在镁合金研究应用中一些亟待解决的问题, 并据此提出了机器学习在镁合金应用方面未来的研究方向和发展趋势。

**关键词** 机器学习; 镁合金; 性能预测; 合金设计; 数据驱动

**分类号** TG146.2

## Applications of machine learning on magnesium alloys

WU Zheng<sup>1)</sup>, LI Quanan<sup>1,2,3)✉</sup>, CHEN Xiaoya<sup>1,2)</sup>, ZHENG Zeyu<sup>1)</sup>, ZHANG Nana<sup>1)</sup>, WANG Zheng<sup>4)</sup>

1) School of Materials Science and Engineering, Henan University of Science and Technology, Luoyang 471023, China

2) Provincial and Ministerial Co-construction of Collaborative Innovation Center for Non-ferrous Metal New Materials and Advanced Processing Technology, Luoyang 471023, China

3) Longmen Laboratory, Luoyang 471000, China

4) School of Computer and Artificial Intelligence, Zhengzhou University, Zhengzhou 450000, China

✉Corresponding author, E-mail: [qali@haust.edu.cn](mailto:qali@haust.edu.cn)

**ABSTRACT** In materials genetic engineering, data-driven machine learning techniques have garnered significant attention as a powerful new tool in the field of magnesium alloys. Traditional empirical trial-and-error methods and those based on density functional theory have struggled to keep pace with the continuous advancements in material science needs owing to high time costs and low efficiency. By relying on statistical methods instead of solving physical equations, machine learning can quickly predict material properties at a low cost, provided the connection between descriptors and target properties is identified. This capability can streamline the experimental process. Magnesium and its alloys show tremendous potential in aerospace, automotive, and other fields owing to their low density and high specific strength. However, their industrialization has been limited by several challenges, including the varied effects of different alloying elements, preparation and processing defects, deformation difficulties, and the common trade-off between strength and ductility. Machine learning can accelerate the discovery of novel magnesium alloys or processing parameters, and explore the relationships between their physicochemical characteristics and target properties. This paper comprehensively and systematically

收稿日期: 2024-03-10

基金项目: 国家自然科学基金资助项目 (52371108, 52201119); 龙门实验室前沿探索课题资助项目 (LMQYTSKT014)

reviews the research progress of machine learning applications in magnesium alloys. It introduces the basic processes and various methods of machine learning, including data set collection, data preprocessing, model building, and performance evaluation. The classification of machine learning algorithms is summarized briefly. The paper then focuses on the research achievements of machine learning applied in many aspects, such as machining processes, microstructure, mechanical properties, corrosion resistance, hydrogen storage properties, intrinsic properties (reinforcement mechanism, anisotropy, etc.) and inverse design. Factors such as alloy compositions, test temperature and time, second phase, and Schmid factor can be considered as features and input into machine learning models for training. These models not only accelerate the design of novel high-performance magnesium alloys but also enhance the understanding of magnesium alloy mechanisms. Additionally, the paper analyzes some urgent issues in the research and application of machine learning in magnesium alloys. These include insufficient prediction of the chemical and physical properties of magnesium alloys, the nascent stage of predicting the design and service performance of magnesium alloy components, and the lack of high-quality data sets. Finally, the paper proposes future research directions and development trends in the application of machine learning in magnesium alloys.

**KEY WORDS** machine learning; magnesium alloy; performance prediction; alloy design; data-driven

镁及其合金作为迄今为止最轻的工程材料<sup>[1]</sup>, 在 3C 产品、航空航天、轨道交通和医疗器械等领域得到广泛应用. 镁合金具有低密度、高比强度和比刚度以及优异的阻尼性、导热性、切削加工和铸造性能等优良特性, 对于工业材料的轻量化趋势、节约能源和实现“碳中和”有着重大意义<sup>[2-3]</sup>. 在《中国材料科学 2035 发展战略》中, 轻质高强金属材料成为优先发展的领域<sup>[4]</sup>. 尽管镁合金具有优越的应用潜力, 但在产业化方面仍面临诸多挑战, 例如由于存在常见的铸造缺陷, 其综合性能受限, 往往不能满足工业生产的需求; 由于镁合金的密排六方结构, 在变形过程中没有足够的滑移系协调变形, 在轧制成形过程中板材容易产生边裂等问题<sup>[5]</sup>. 镁合金的化学性质活泼, 并且镁合金氧化膜具有疏松多孔的特点, 导致镁合金在大多数环境中容易遭到腐蚀破坏, 改善镁合金加工工艺, 探究表面处理参数也是面临的主要问题. 此外, 镁合金生产过程中也受到生产企业单一化、能源过度消耗、粉尘等污染问题的困扰. 因此, 需要突破镁合金产业发展的工程化问题, 提高加工效率和材料研发智能化.

在人工智能(AI)快速发展的背景下, 以“大数据+AI”为标志的数据驱动, 已成为材料科学发展的第四范式<sup>[6-7]</sup>. 其中, 机器学习(ML)是数据驱动科学的一个快速发展的子领域. 由于大量实验研究的“试错法”和根据研究者经验的材料传统研发模式的实验周期长、成本高<sup>[8]</sup>, 具有不确定因素和随机变量的影响, 因此传统研发模式无法清晰表明材料内在性质和目标属性之间的关系, 难以满足镁合金复杂的功能需求, 极大地制约着新材料的研发. 另一方面, 基于第一性原理计算和分子动

力学模拟等方法的计算材料科学的第三范式, 需要耗费大量时间进行优化与计算, 并且只能运用在特定的模型中, 不能满足材料定量表征的需要<sup>[9]</sup>, 无法识别合金晶体缺陷、凝固和相变等行为, 不能对实际生产进行指导. 机器学习是计算机科学和统计学的交叉学科<sup>[10]</sup>, 是人工智能的关键技术之一, 利用机器学习算法与镁合金数据相结合, 建立镁合金性能的预测模型, 有利于高性能镁合金的开发. 由于机器学习模型的普适性、准确性和高效性等优点, 机器学习在镁合金的应用引起了学者们的广泛关注.

机器学习算法可以建立输入(如镁合金成分、组织和工艺等)与输出(如镁合金力学性能、腐蚀行为和相变等)之间的映射关系, 可以实现材料成分、组织结构、加工工艺、服役性能的预测与新材料的发现. 机器学习对高维函数有着优异的表达能力, 可以辅助研究人员从不同维度、不同尺度深入了解材料的特征机理, 理解材料问题的科学本质. 机器学习方法的核心在于学习过程, 在数据的驱动下, 机器学习算法根据学习到的信息、趋势和模式对给定任务提供预测, 并通过训练来提高给定任务的表现<sup>[11]</sup>. 随着材料基因组计划、美国先进制造、中国材料基因组工程等的提出, 材料数据的累积得到了发展. Yang 等<sup>[12]</sup>综述了 2022 年全球镁合金研究的进展, 一年内发表与镁合金有关的文章高达 13516 篇, 这为镁合金领域积累了大量的数据, 为机器学习模型的构建奠定了现实基础.

近年来, 机器学习与镁合金研究的结合已经成为了热点领域. 机器学习的应用主要集中在预测镁合金性能上, 机器学习方法通过依据现有的镁合金数据, 制定合金成分/工艺-结构-性能的联

系<sup>[13-14]</sup>,同时训练机器学习模型,预测和设计新型镁合金. Xu等<sup>[15]</sup>通过文献收集了112条AZ31镁合金的数据,分别运用人工神经网络和支持向量机算法,构建了AZ31镁合金拉伸性能的预测模型,预测了屈服强度、极限抗拉强度和延伸率,并通过制备新合金成分的AZ31挤压镁合金验证了模型的准确性.另外,任何实验或模拟结果都可视为一个数据点,不仅材料本身的相关特性可用作机器学习的特征,制备和加工方法的参数也可用作训练机器学习模型的输入. Wiese等<sup>[16]</sup>通过人工神经网络算法,构建了Mg-Gd合金的晶粒尺寸、力学性能、织构以及工艺参数(挤压速度和温度)与Gd含量的关系,训练后的模型可以在给定的工艺参数范围内准确预测制造后合金的性能.这为设计镁合金加工参数和性能预测提供了一种新方法,大大降低了设计成本,加快了新材料的发现速度.

本文在简单介绍了机器学习的基本原理和相关模型基础上,以机器学习对镁合金的性能、加工工艺、显微组织和逆向设计为例,综述了机器学习在镁合金研究领域的应用进展,最后对机器学习预测镁合金研究的应用前景做出了展望.

### 1 机器学习方法与模型

在传统的材料计算科学中,算法是以完善的物理和/或化学定律为基础.相比在给定处理好的数据和算法的情况下,机器学习方法能够在没有明确规律指导的情况下推断出合金数据集中的潜在联系.机器学习方法主要包括以下步骤:数据集收集、数据预处理、模型构建和模型性能评估.图1显示了机器学习的流程.首先,通过实验、文献和公开数据库收集有关合金的特性和性能的数据,

确定材料特征(描述符).其次是对收集到的数据进行预处理,保证其数据项无缺失或异常值<sup>[17]</sup>,以减少训练误差.然后将数据集划分为测试集和训练集,提高模型的泛化能力,选择合适的算法和参数进行学习.最后是对模型的评估和解释,通过评价指标对模型的预测精度评估后,进一步通过调节模型参数实现对新材料的预测.下面将详细讨论这四个方面的更多细节.

#### 1.1 数据集收集

数据集的收集是机器学习的重点.一般通过实验结果、文献或在线数据库收集所需要的数据集信息.合金的数据集信息包括输入(特征)和输出(目标属性).“输入”通常包括元素组成、原子参数、结构参数和工艺条件等.“输出”通常包括硬度、屈服强度、延伸率、耐蚀性和导电性等.然而,合金中实验测量的成分和性能往往偏离实际值,每个人做实验的标准也大相径庭,导致收集到的数据集的数据标准不一致,从而产生误差.误差较大的样本限制了ML算法的有效性<sup>[18]</sup>.每个机器学习过程还必须要考虑欠拟合和过拟合的问题,欠拟合的原因通常在于模型缺乏表达数据复杂性的能力,或是需要的样本数远少于描述材料的特征个数,这不可避免地会导致很高的训练误差.另一方面,过拟合模型将训练数据中的部分噪声理解为有关信息,因此无法可靠地预测新数据,如图2(a)所示.因此,在数据集收集过程中,保持一致的标准是很重要的,并且还需要识别和剔除虚假数据和缺失样本.

#### 1.2 数据预处理

通常,数据集的高维度和样本数量有限是机器学习中常见的问题,收集到的数据集维度过高

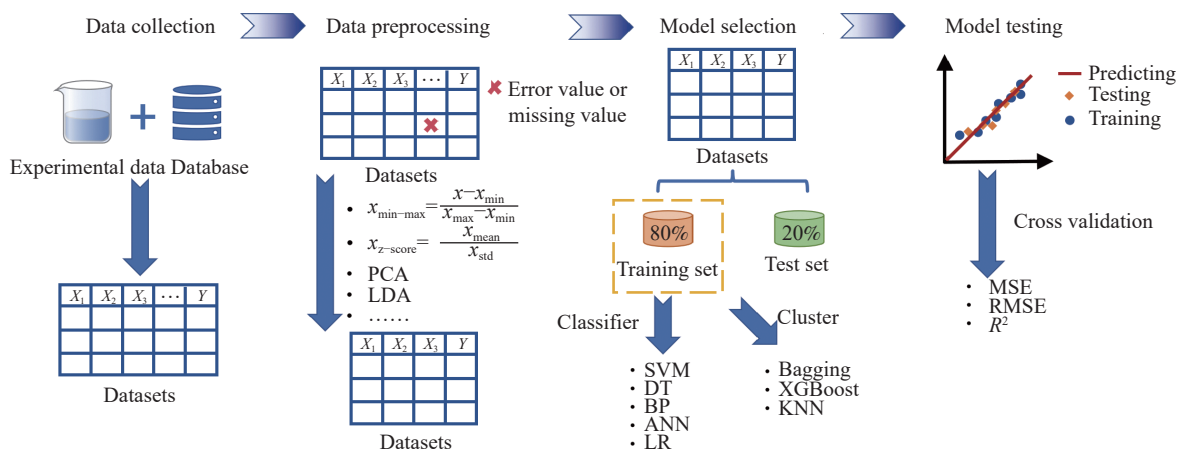


图1 机器学习流程

Fig.1 Machine learning processing

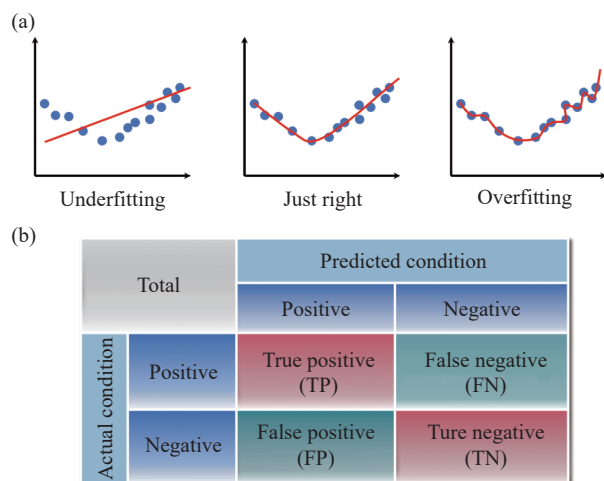


图 2 (a) 欠拟合、正确拟合和过拟合示意图; (b) 分类结果混淆矩阵  
Fig.2 (a) Schematic diagram of underfitting, right fitting, and overfitting; (b) confusion matrix of classification results

造成信息冗余, 增加计算量. 通过对数据预处理, 可以提高数据集的质量, 减少噪声, 提高机器学习的准确性. 因此数据预处理是对数据清洗和转换、特征提取和构建的过程, 通常采用数据清洗或归一化的方法进行. 数据清洗需要平滑噪声、识别数据异常和填充缺失值等, 缺失值填充一般采用删除缺失值样本和用特征的平均值代替缺失值的方法. 归一化的方法可以把不同量纲的数据特征的尺度都缩放到 0~1 之间, 以消除不同数据特征造成的偏差. 特征的选择基于领域的专业知识, 然而其中一些特征与需要预测的目标具有很强的相关性, 另一些特征则微不足道. 这时需要评估特征之间的相关性, 采用主成分分析 (Principal component analysis, PCA) 和线性判别分析 (Linear discriminant analysis, LDA) 的方法降维, 提取主成分, 降低噪声, 提高模型预测的准确性.

### 1.3 模型构建

选择合适的算法是构建机器学习模型的关键, 不同类型的算法适用于不同的任务和特征类型, 因此选择合适的算法可以提高模型的性能和精度. 根据数据类型的不同, 如图 3 所示, 机器学习算法可以分为有监督学习算法、无监督学习算法和强化学习算法<sup>[19-20]</sup>.

有监督学习算法是有标签的训练数据集拟合的过程, 目的是学习输入特征与相应输出之间的映射, 对应材料研究中的材料特征参数与目标属性之间的映射, 以便预测新输入的输出结果. 有监督学习算法常用于处理分类和回归问题. 如果输出是一个连续的变量 (如极限抗拉强度), 则该过程是回归问题. 典型的回归算法有: 对数几率回归 (Logistic

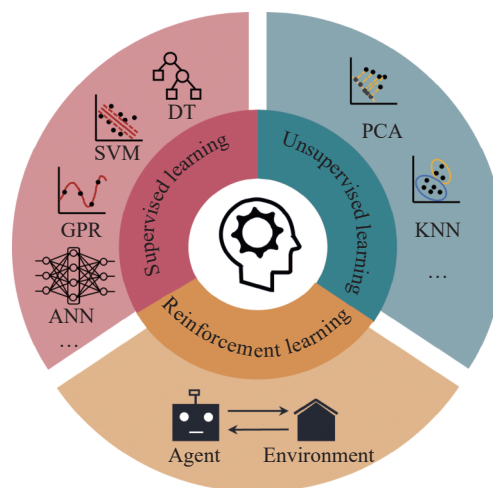


图 3 机器学习方法的简要概述

Fig.3 A brief overview of ML approaches

regression, LR)<sup>[21]</sup>、岭回归 (Ridge regression, RR)<sup>[22]</sup>、高斯过程回归 (Gaussian process regression, GPR)<sup>[23]</sup>、支持向量机 (Support vector machine, SVM)<sup>[24]</sup> 和人工神经网络 (Artificial neural networks, ANN)<sup>[25]</sup>. 如果输出是一个离散的变量 (如是否产生孪晶), 则该过程是分类问题. 典型的分类算法有: 决策树 (Decision tree, DT)<sup>[26]</sup>、随机森林 (Random forest, RF)<sup>[27]</sup>、朴素贝叶斯 (Naive Bayes, NB)<sup>[28]</sup> 和 K 近邻 (K nearest neighbors, KNN)<sup>[29]</sup> 算法.

对于无监督学习算法, 训练无标签的数据集进行拟合, 目的是试图识别输入数据本身的关系 (如这个数据可能有何种模型或者结构), 从而找到数据中隐藏的模式或结构, 将输入数据分成不同的组或类. 无监督学习算法通常又分为聚类和降维, 聚类算法是将相似的数据分成一组, 降维算法用于将高维数据映射到低维空间. 主要有 K-Means 算法和 PCA 算法.

强化学习算法是智能系统通过与环境交互和使用奖励信号优化模型决策的学习<sup>[30]</sup>, 其输入数据直接反馈给模型, 模型根据环境的变化不断试错调整以找到最优解. 与其他机器学习方法相比, 强化学习侧重于从交互中进行所需目标的学习, 通过自适应性来学习目标特征. 强化学习已广泛应用于机器人、游戏和计算机翻译软件中, 在材料科学领域强化学习被应用于预测反应途径和最佳化学反应条件<sup>[31-32]</sup>.

### 1.4 模型评估

最后, 需要对模型进行评估, 不同模型之间进行比较, 为模型选择提供一个标准. 通常采用以下几个评价指标评估模型的准确性.

对于处理回归问题构建的 ML 模型, 一般采用皮尔逊相关系数 (Pearson correlation coefficient,  $r$ ), 决定系数 (Coefficient of determination,  $R^2$ ) 和均方根误差 (Root mean square error, RMSE) 3 种评价指标来对模型进行评估。

$$r = \frac{\sum_{i=1}^N (y_i - \bar{y})(\hat{y}_i - \bar{\hat{y}})}{\sqrt{\sum_{i=1}^N (y_i - \bar{y})^2 \sum_{i=1}^N (\hat{y}_i - \bar{\hat{y}})^2}} \quad (1)$$

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^N (y_i - \hat{y}_i)^2}{\sum_{i=1}^N (y_i - \bar{y})^2} \quad (2)$$

$$\text{RMSE} = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^N (y_i - \hat{y}_i)^2}{N}} \quad (3)$$

其中,  $N$  为样本总数,  $y_i$  和  $\hat{y}_i$  分别为样本  $i$  实际的输出值和预测的输出值,  $\bar{y}$  和  $\bar{\hat{y}}$  分别为样本实际的输出值和预测的输出值的平均值。其中, RMSE 提供了预测值和实际值之间误差大小的直观度量, RMSE 越低, 模型性能越好;  $r$  和  $R^2$  越高, 模型拟合程度越好。

对于处理分类问题构建的 ML 模型, 常用混淆矩阵表示二元分类性能。通过混淆矩阵得出的参数为总体分类精度 (Overall classification accuracy, CA), 查准率 (Precision) 和查全率 (Recall)。如式 (4) ~ (6) 所示:

$$\text{CA} = \frac{\text{TP} + \text{TN}}{\text{TP} + \text{TN} + \text{FP} + \text{FN}} \quad (4)$$

$$\text{Precision} = \frac{\text{TP}}{\text{TP} + \text{FP}} \quad (5)$$

$$\text{Recall} = \frac{\text{TP}}{\text{TP} + \text{FN}} \quad (6)$$

如图 2(b) 所示, 其中 TP 为正确判断为正的样本数, FP 为错误判断为正的样本数, FN 为正确判断为负的样本数, FN 为错误判断为负的样本数。CA 表示正确分类的样本数 (TP+TN) 占总样本数的百分比, 然而每个类别的样本数量不平衡, 单独的 CA 结果可能会导致错误的性能评估<sup>[33]</sup>, 因此需要另外两个参数的度量。

查准率表示正确预测为正的样本数占所有预测的正样本数的百分比, 表示了预测的准确性; 而查全率表示正确预测为正的样本数占所有实际正

样本数的比例, 表示了正样本被正确检验出的概率。查准率和查全率是一对矛盾的度量。一般来说, 查准率高时, 查全率往往偏低; 而查全率高时, 查准率往往偏低, 可以根据具体问题选择合适的度量标准。

训练集通常用于学习模型, 测试集用于评估模型的泛化能力, 即泛化能力越强, 对应的学习模型越优异<sup>[34]</sup>。然而, 超参数的调优导致模型适应特定的噪声而产生误导性结果的过拟合, 模型识别参数效率低下而产生的较高误差的欠拟合都不利于 ML 模型的泛化。因此, 采用交叉验证 (Cross validation, CV) 的方法用于评估 ML 模型的可靠性<sup>[35]</sup>, 以得到最优模型。一般采用  $K$  折交叉验证的方法<sup>[36]</sup>, 即将数据集划分为测试集和训练集, 将训练集划分为  $K$  个大小相等的子集, 依次选用第  $K$  个子集, 每次把当前子集作为验证集, 其余所有样本作为训练集, 进行模型的训练和验证, 测试集评估调优模型的泛化能力。算法的超参数可以根据验证集的分值进行相应优化, 避免过拟合和欠拟合。

## 2 机器学习在镁合金中的应用

机器学习算法在镁合金应用领域研究一般是镁合金性能预测、辅助显微组织表征、工艺优化、材料多目标优化和逆向设计。机器学习算法有不同的类型和应用, 不同成分的镁合金所收集的数据集、选择的机器学习算法和应用的模型都是不同的。在接下来的小节中, 总结了近年来机器学习在镁合金中的应用。

### 2.1 镁合金性能预测

在实际应用之前准确预测合金的性能是一项具有挑战性的任务, 这需要全面了解合金成分、组织、工艺和性能之间复杂的相互作用。传统的经验和理论实验方法往往由于缺乏足够的数据和无法捕捉全部系统而受到限制。最近的研究已经证明了 ML 技术准确、有效和可靠地预测合金性能方面的潜力。通过对合金成分、加工参数和镁合金性能的数据集进行训练, ML 模型可以学习和识别给定镁合金性能的关键影响因素, 并预测其在各种条件下的行为。主要分为以下四个方面。

#### 2.1.1 力学性能

机器学习是一种数据驱动的方法, 适用于复杂非线性关系的特征提取和回归分析<sup>[37]</sup>。许多研究报道, 机器学习方法有助于发现所需目标特征的合金材料, 预测合金材料的力学性能并将其运用于合金设计<sup>[38-39]</sup>。镁合金材料的力学性能由显微

组织决定, 而微观结构又受到加工工艺和热处理参数的影响, 合金成分和参数设计往往组成了一个高维空间, 其中隐藏着实验无法验证的相关性. 如 Suh 等<sup>[40]</sup>采用 ANN 研究了 AZ61 和 AZ91 镁合金棒材的热处理参数(时效温度和时间)、显微组织(连续析出相和不连续析出相等)和力学性能之间的相关性. 具有创新性地通过数据的平均值和标准差将数据集扩展了 9 倍, 增加了可用数据, 降低了过拟合的风险, 提高了预测模型的可靠性, ANN 模型预测准确性可达到 98%, RMSE 小于 4.7. 并用 DT 评估了 Al 元素含量是影响抗拉屈服强度(TYS)和抗压屈服强度(CYS)的主要因素. 在传统的塑性变形工艺中, 挤压可以通过一次工艺生产出薄壁镁合金部件<sup>[41]</sup>, 扩大了镁合金的应用范围. 由于镁合金低温成形性较差, 大大提升了生产成本, 限制了挤压镁合金工业生产应用, 因此有必要建立挤压镁合金的工艺窗口. 然而, 加工窗口优化需要较高的时间成本. 近年来, 机器学习的快速发展为镁合金加工窗口优化提供了一条捷径, 可以有效促进更快地选择最合适的工艺参数<sup>[42]</sup>. Suh 等<sup>[43]</sup>基于 ANN 和 SHAP(Shapley Additive exPlanations)相结

合的可解释机器学习(Interpretable machine learning, IML)方法, 通过工艺参数(挤压温度)、合金元素和显微组织预测了 Mg-Al-Zn-Mn-Ca-Y 合金的力学性能, 提供了挤压镁合金工艺窗口的规划. 基于 SHAP 的特征重要性分析说明了 Al 元素是合金强度的重要特征, Mn 元素对合金伸长率的贡献最大. 相比较常规的单个学习器, 多个学习器组成的集成学习模型有着更好的预测精度和泛化能力. 与传统分析方法相比, 机器学习能够有效地筛选不重要的特征参数, 直观地表明重要特征参数的潜在组合. Hou 等<sup>[44]</sup>在 Mg-Zn-(Y, Nd, Gd)-Zr 生物医用镁合金体系下, 收集了 365 个镁合金数据样本, 采用 SVM、RF、GPR 等 6 种 ML 模型对合金的力学性能进行了预测, 并对单一模型进行了模型集成. 如图 4 所示显示了性能最好的集成模型的预测值和实验值. 又使用未在数据集中的数据对模型进行验证, 其中极限抗拉强度(UTS)、屈服强度(YS)和伸长率(EL)的平均误差分别为 8.3 MPa、3.3 MPa 和 4.7%. 表明模型对医用 Mg-Zn-Y-(Nd)合金的拉伸性能有着良好的预测能力.

此外, Bingö等<sup>[45]</sup>利用 ANN 和基因表达编程

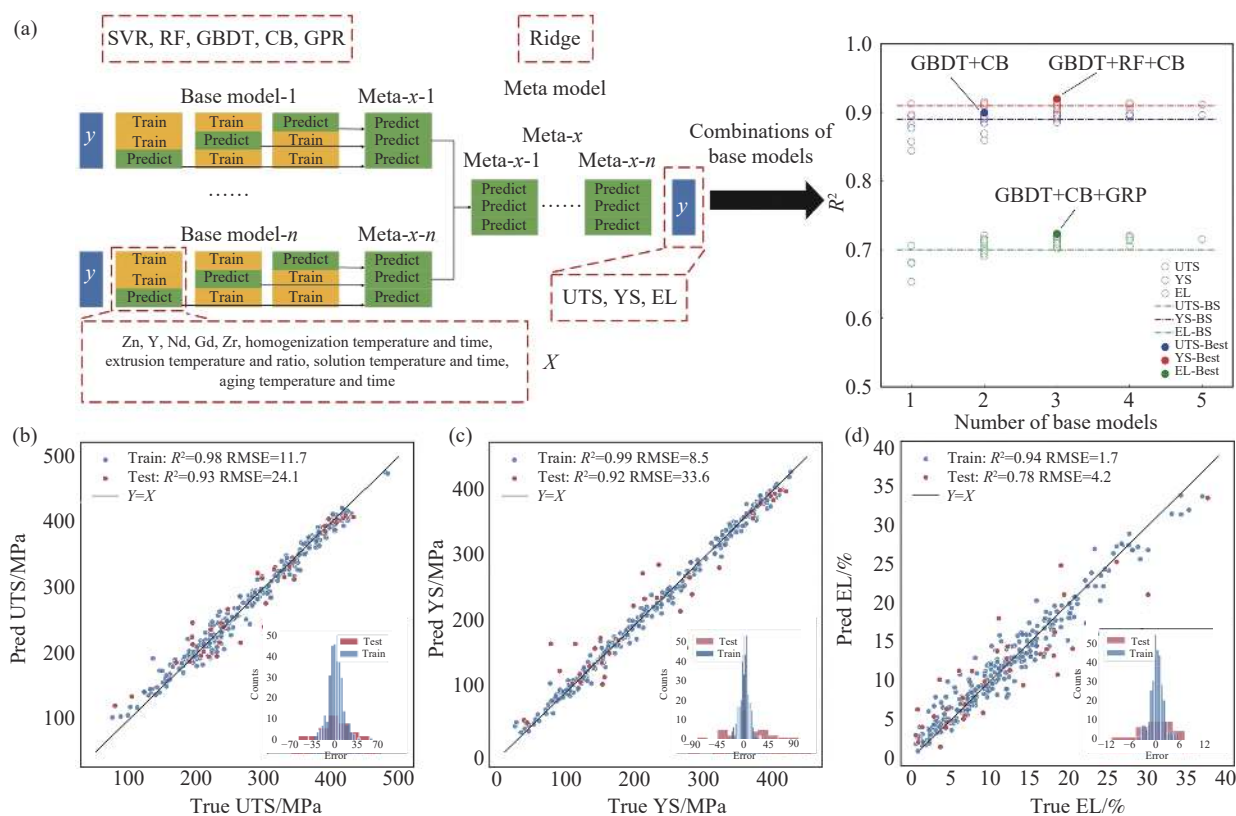


图 4 ML 预测医用镁合金力学性能的过程和结果.(a) ML 模型的训练和预测过程及最佳集成模型的预测结果; (b) 极限抗拉强度; (c) 屈服强度; (d) 伸长率<sup>[44]</sup>

Fig.4 Process and results of ML for predicting mechanical properties of biomedical magnesium alloys: (a) training and prediction process of the ML model, and prediction results of the best ensemble model: (b) UTS; (c) YS; (d) EL<sup>[44]</sup>

(Gene expression programming, GEP) 算法预测了 ZE20 镁合金的真实应力, 并用 GEP 模型开发了一个适用于预测 ZE20 镁合金的真实应力的数学公式. 两种模型的预测值与实验值之间的  $R^2$  均达到 0.99, RMSE 分别为 3.12 MPa 和 8.48 MPa, 即 ANN 模型预测能力较好. 表 1 总结了机器学习在预测镁合金力学性能方面的应用. 机器学习算法通过筛选不同的合金成分和工艺参数, 加快了早期合

金设计, 完善加工工艺窗口, 极大提高新材料开发的效率和准确性.

### 2.1.2 耐腐蚀性能

镁合金的腐蚀问题是许多工业应用中的一个重要挑战. 镁合金化学性质活泼, 自腐蚀电位较低, 极大地限制了其在化工和海洋等腐蚀环境下的适用性. 传统的腐蚀速率预测方法依赖于实验或经验模型, 既耗时又昂贵. 此外, 如何将实验与

表 1 机器学习在预测镁合金力学性能的应用

Table 1 Application of machine learning to predict the mechanical performance of Mg alloys

Materials	Input	Model	Output
AZ31 alloy <sup>[15]</sup>	Alloy compositions: Zn, Al, Mn, Ca, Si; homogenization temperature and time; extrusion temperature, ratio and speed; rolling temperature, reduction and speed; annealing temperature and duration; angle between loading and processing direction	ANN SVM	Ultimate tensile strength (UTS) Yield strength (YS) Elongation (EL)
Mg–Al–Zn alloys <sup>[40]</sup>	Al content; aging temperature and time; discontinuous and continuous precipitates; average grain size; the maximum pole intensity of the basal planes; Schmid factor for basal slip	ANN DT	Tensile yield strength (TYS) Compressive yield strength (CYS)
Mg–Al–Zn–Mn–Ca–Y alloys <sup>[43]</sup>	Alloying elements: Al, Zn, Mn, Ca, Y; extrusion temperature Average grain size; fraction of solutes; secondary particles; the maximum pole intensity of the basal planes; Schmid factor for basal slip	ANN	Tensile yield strength (TYS) Ultimate tensile strength (UTS) Fracture elongation (FE)
Mg–Zn–(Y, Nd, Gd)–Zr alloys <sup>[44]</sup>	Alloy compositions: Mg, Zn, Y, Nd, Zr, Gd; homogenization temperature and time; extrusion temperature and ratio; solution temperature and time; aging temperature and time	RR SVR GBDT RF CB GPR	Ultimate tensile strength (UTS) Yield strength (YS) Elongation (EL)
ZE20 alloy <sup>[45]</sup>	Deformation temperatures; strain rates	ANN GEP	True stress
Mg alloys <sup>[46]</sup>	MPCR deformation pass; the position of measurement in three-dimensional Cartesian coordinates ( $x, y, z$ )	ANN GANs	Vickers hardness (HV)
AZ31B alloy <sup>[47]</sup>	Strain; strain rate; deformation temperature	BP-ANN GABP-ANN CFBP-ANN	Flow stress
Mg–RE alloys <sup>[48]</sup>	Alloying elements: Zn, Gd, Y, Nd, Ce, Zr; extrusion temperature and ratio; solution temperature and time; aging temperature and time	SVR	Ultimate tensile strength (UTS) Yield strength (YS) Elongation (EL)
ZK60 alloy <sup>[49]</sup>	Severe plastic deformation method: PTCAP, ECAP, HRDSR; severe plastic deformation pass; severe plastic deformation temperature	ANFIS SVM GEP GP	Ultimate tensile strength (UTS) Yield strength (YS) Failure elongation
AZ61 alloy <sup>[50]</sup>	Stress; strain	Linear regression	Yield strength (YS) Elastic modulus
Mg–Al–Sn–Zn–Ca–Mn alloys <sup>[51]</sup>	Alloying elements: Al, Sn, Zn, Ca, Mn; aging temperature and time	Linear regression SVR BPNN XGBoost	Vickers hardness (HV)
AZ81 alloy <sup>[52]</sup>	Strain; strain rate; deformation temperature	BP-ANN	Flow stress

Note: ANN: Artificial neural network; SVM: Support vector machine; DT: Decision tree; RR: Ridge regression; SVR: Support vector machine regression; GBDT: Gradient boosting regression tree; RF: Random forest; CB: CatBoost; GPR: Gaussian process regression; GEP: Gene expressing programming; GANs: Generative adversarial networks; BP-ANN: Back-propagation artificial neural network; GABP-ANN: Genetic algorithm-optimized back-propagation artificial neural network; CFBP-ANN: Cascade-forward back-propagation artificial neural network; ANFIS: Adaptive neuro fuzzy inference system; GP: Genetic programming; BPNN: Back-propagation neural network; XGBoost: eXtreme gradient boosting.



更快的机器学习方法相结合仍然是研究的一个热点与挑战. 近年来, 机器学习算法已经被证明是预测材料腐蚀行为的有力工具<sup>[53]</sup>. Pagadala 等<sup>[54]</sup> 基于 Nyquist 和 Bode 的 100 个数据点, 以及动电位(PD)极化的 5400 个数据点, 采用 XGBoost 模型对不同 Sn 成分的 Mg-Sn 合金在模拟体液不同浸泡时间下的腐蚀行为进行了预测. 根据预测后的数据重新绘制了 Nyquist 图、PD 图和 Bode 图, 与实验数据得到的曲线吻合较好, 如图 5 所示. 结果表明, XGBoost 模型在预测腐蚀速率方面具有高的准确性, Mg-5Sn 合金具有最好的耐蚀性能. ML 通过预测结果极大地帮助和理解了腐蚀机制, 有助于减少实验时间, 同时也有助于理解生物医学应用的材料性能, 结果证明了 ML 模型在预测镁合金腐蚀行为方面的潜力.

此外, Moses 等<sup>[55]</sup> 基于镁合金的化学成分(Al, Zn, Mn, Si, Fe, Cu, Ca, Sn), 采用 Linear regression、DT、Extra trees (ET)、RF、KNN、XGBoost 和 ANN 7 种机器学习模型分别预测了镁合金的腐蚀电流密度和腐蚀电位, 结合 SHAP 可视化了影响镁合

金腐蚀的输入参数. 结果表明 Al 元素对腐蚀电流密度的增加影响最大, Zn 对降低镁合金腐蚀电位的影响最显著. Lu 等<sup>[56]</sup> 选用合金成分和测试环境(氯离子浓度)预测了腐蚀电位和腐蚀电流密度, 比较了 RF 等 4 种机器学习算法, RF 算法表现出最准确的预测. 为了提供模型的泛化能力, 他们将化学成分特征转换为原子和物理特征, 这样输入特征就不局限于特定的化学成分, 并验证了预测镁合金腐蚀行为的准确性和可行性. 这些模型可用于优化合金成分, 为设计适合不同环境的耐蚀镁合金提供了辅助工具和见解.

### 2.1.3 储氢性能

氢能作为一种储量丰富、分布广泛和能量密度高的绿色能源受到人们的广泛关注<sup>[57]</sup>. 储氢技术的发展是氢能应用的关键, 目前面临着成本高、储氢密度低的问题<sup>[58]</sup>. 镁由于其理论储氢容量(质量分数)高达 7.6%, 被认为是最有前途的储氢材料之一. 由于其生成的氢化物较稳定, 吸氢动力学较差, 主要研究集中在降低镁基储氢材料工作温度和加快其吸放氢反应速率. 相比较传统的实验和

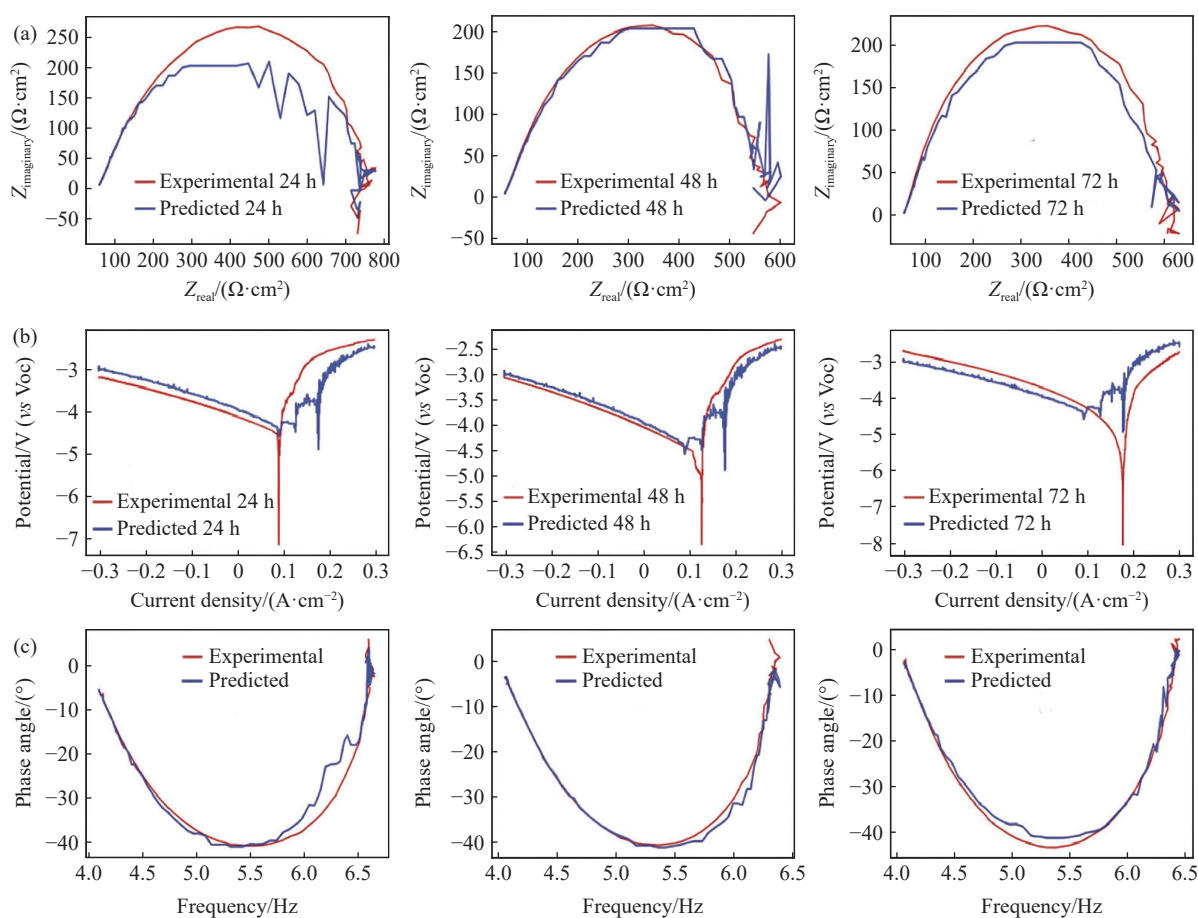


图 5 Mg-5Sn 在浸泡 24 h、48 h 和 72 h 后的预测和实验结果<sup>[54]</sup>. (a) Nyquist 结果; (b) 动电位结果; (c) Bode 结果.

Fig.5 Predicted and experimental results for Mg-5Sn after immersion for 24 h, 48 h, and 72 h: (a) Nyquist results; (b) PD results; (c) Bode results<sup>[54]</sup>

成本过高的理论计算, 数据驱动的 ML 能够建立材料性能与复杂物理因素之间的关系, 逐渐得到研究人员的青睐. 如 Suwarno 等<sup>[59]</sup> 基于 ML 建立了 Zr-Ti 基 AB<sub>2</sub> 合金的储氢数据库, 并讨论了合金元素对合金形成热和储氢容量的影响. 这为提高镁基储氢材料的性能提供了新的途径.

Malinova 和 Guo<sup>[60]</sup> 以金属元素成分为输入, 基于 ANN 算法建立了预测镁合金储氢性能的机器学习模型. 并设计了图形用户界面 (Graphics user interface, GUI), 可用于预测镁合金的储氢能力、温度和放氢压力与其化学成分的关系, 以及研究和绘制不同合金元素对镁合金储氢性能的影响. Rahnama 等<sup>[61]</sup> 使用线性回归、神经网络、贝叶斯线性回归和提升树回归算法预测了镁基储氢合金和其他合金中氢化物的氢质量百分比, 其最佳模型 (提升树回归模型) 的  $R^2$  为 0.83, MSE 为 0.19, 结果表明材料的类别、温度和生成热对氢质量百分比的影响较大. Dong 等<sup>[62]</sup> 收集了 826 个镁合金储氢实验数据样本, 以镁合金储氢材料的合金元素、加工条件、动力学性能和热力学性能为输入, 最大吸氢量和最大放氢量作为输出, 利用梯度提升回归 (Gradient boosting regression, GBR), 多层感知机

(Multilayer perceptron, MLP), SVR 和 RF 算法建立了回归模型. 如图 6 所示, GBR 算法表现出最好的预测精度, 其预测值和实际实验值接近最佳拟合. 引用 SHAP 方法揭示了密度和吸氢温度是影响镁合金最大吸氢量的重要因素. 在此基础上, 设计并预测了含有 16 种金属元素的二元镁合金和含有其他 15 种金属元素的 Mg-Ni 基三元镁合金的储氢性能, 发现 96Mg-4Sm 和 95Mg-1Ni-4Sm 在吸氢温度 220 °C 和放氢温度 275 °C 下具有较高的最大吸氢量和最大放氢量, 是潜在的优异镁基储氢合金.

#### 2.1.4 固有属性

机器学习在预测材料的各种性能方面越来越成功, 也为从合金本身找寻规律提供了新的思路. 镁合金由于其独特的密排六方晶体结构表现出各向异性行为, 显著影响镁合金部件的整体性能和耐久性. Byun 等<sup>[63]</sup> 基于 ZK60 镁合金在 11 种退火条件和 3 种加载方向下构建了各向异性压缩行为的预测模型, 他们创新的采用生成对抗网络 (Generative adversarial networks, GAN) 辅助门控循环单元 (Gate recurrent unit, GRU) 算法, 相比于 ANN、深度神经网络算法 (Deep neural networks, DNN) 和单

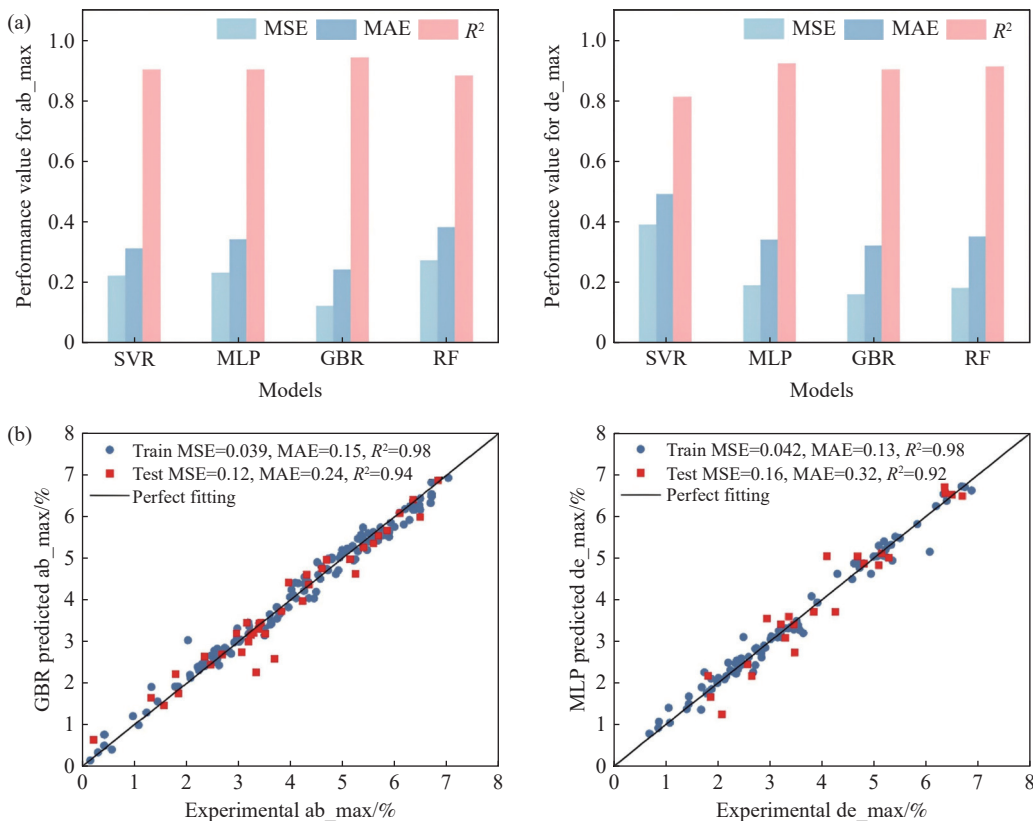


图 6 (a) 随机森林、支持向量回归、梯度提升回归和多层感知机模型在预测最大吸氢量和最大放氢量的表现; (b) 梯度回归提升模型的预测结果<sup>[62]</sup>  
**Fig.6** (a) Performance of RF, SVR, GBR, and MLP models in predicting maximum hydrogen storage and release; (b) comparison between predicted values by the GBR model and experimental values<sup>[62]</sup>

独的 GRU 算法表现出最好预测精度和泛化能力. 特别是各向异性行为无法通过实验在单一尺度上进行阐明, 他们的研究为利用数据增强的 ML 技术预测变形镁合金的各向异性变形行为提供了一个新的见解. Hall-Petch 斜率( $k$ )是重要的材料参数, 反映了晶界强化效率. 镁合金的  $k$  值与合金元素、变形过程和测试条件有关, 因此这些材料参数的影响不能准确的对镁合金  $k$  值进行预测. Guan 等<sup>[64]</sup>采用机器学习方法预测了镁合金 Hall-Petch 斜率( $k$ ), 通过 ANN 和 RF 算法建立了预测模型. 他们将训练集和测试集划分为 70%:30% 和 90%:10% 进行对比, 如图 7 所示为影响  $k$  值的因素和两种模型预测的结果. 结果表明, 增加训练数据集可以提高两种模型的预测效率, 并且与 RF 模型相比, ANN 模型具有更高的精度.

## 2.2 镁合金组织预测

在实验数据中表征微观结构是一个费力而昂贵的过程, ML 是一种实用的合金设计方法, 只要可以提取合适的特征描述符, 就可以对合金微观结构进行定量研究, 没有全面的实验也可以有效地设计合金. 合金的显微组织往往包含多种结构特征, 这给准确统计大量数据和建立一致标准的特征带来了挑战.

Mi 等<sup>[65]</sup>使用机器学习方法建立了 Mg-Mn 合金超细晶晶粒的设计模型. 他们将合金元素 (Mn, Al, Zn, Sn, Ca) 和工艺参数 (挤压温度和挤压速度) 设为输入特征, 细晶和超细晶为输出特征, 运用

KNN、DT、SVM 和 RF 算法建立了分类模型以区分超细晶结构形成的细节, 寻找制备超细晶镁合金成分和工艺的路线. 根据模型得到了 4 条超细晶镁合金加工路线, 实现了一种基于细晶粒强化理论基础和分类机器学习算法的镁合金组织设计策略. 了解晶界损伤的开始对提高镁合金延展性的设计具有重要意义, Zhang 等<sup>[66]</sup>运用 XGBoost、GBDT、ANN 和 SVM 算法, 构建了二元分类模型来确定晶界在断裂应变下是否会发生损伤. 输入特征为 19 个晶体学和几何特征, 该模型在预测平行挤压方向和垂直挤压方向的试样晶界损伤时, 模型评估指标 (Area under the curve, AUC) 得分达到了 72.0% 和 81.0%. 结果表明晶界损伤多发生在与载荷方向垂直、相邻晶粒尺寸较大和轴向偏差较大的晶粒上. 此外, 目前还没有有效的标准可以准确预测塑性变形过程中孪晶的形核, 影响孪晶形核因素的复杂性和不确定性在镁合金研究和制备过程中成为了具有挑战性的问题. Gui 等<sup>[67]</sup>提出了一种结合机器学习和电子背散射衍射 (EBSD) 的方法来预测 Mg-RE 合金中孪晶形核, 如图 8 所示. 利用 XGBoost、ANN 和基于分类回归树 (Classification and regression tree, CRAT) 的集成算法作为分类器预测 Mg-4Y-3Nd-2Sm-0.5Zr 合金孪晶形核行为. 选用晶粒尺寸和施密德因子等 8 个特征来评价其对孪晶形核的影响, 其中基于 CRAT 的集成算法获得了最高的 AUC 分数. 该研究强调了将机器学习与 EBSD 相结合理解 Mg-RE 合金在变形

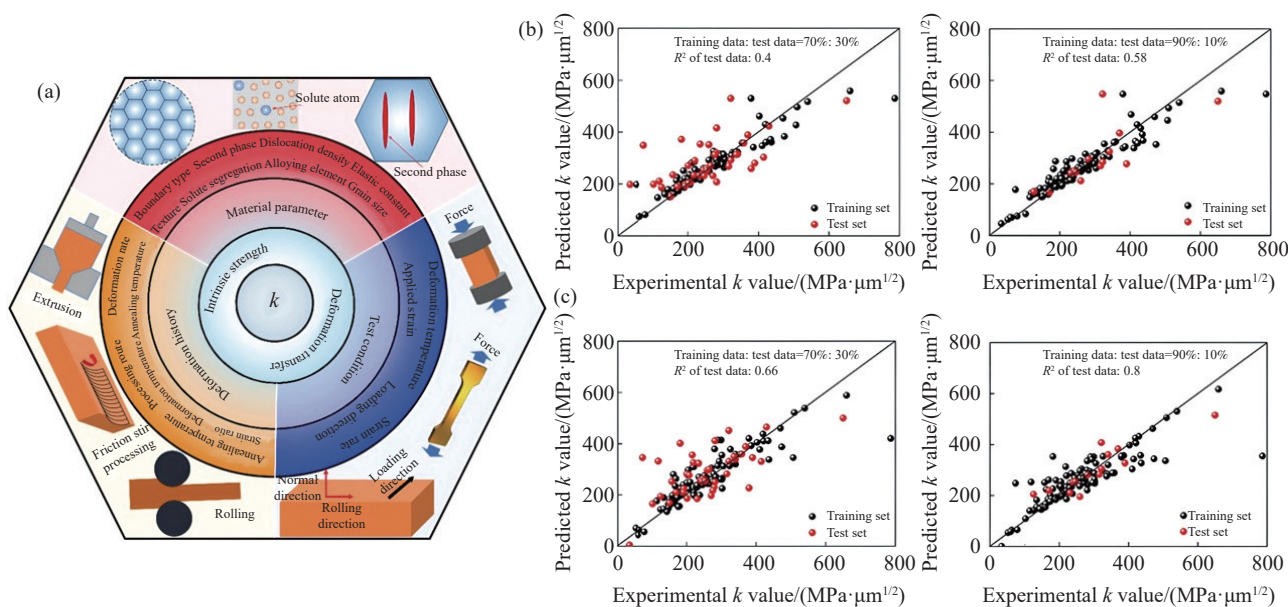


图 7 (a) 影响 Hall-Petch 斜率  $k$  的因素汇总; (b) 随机森林预测结果; (c) 神经网络预测结果<sup>[64]</sup>

Fig.7 (a) Summary of factors influencing the Hall-Petch slope  $k$ ; (b) RF prediction results; (c) ANN prediction results<sup>[64]</sup>

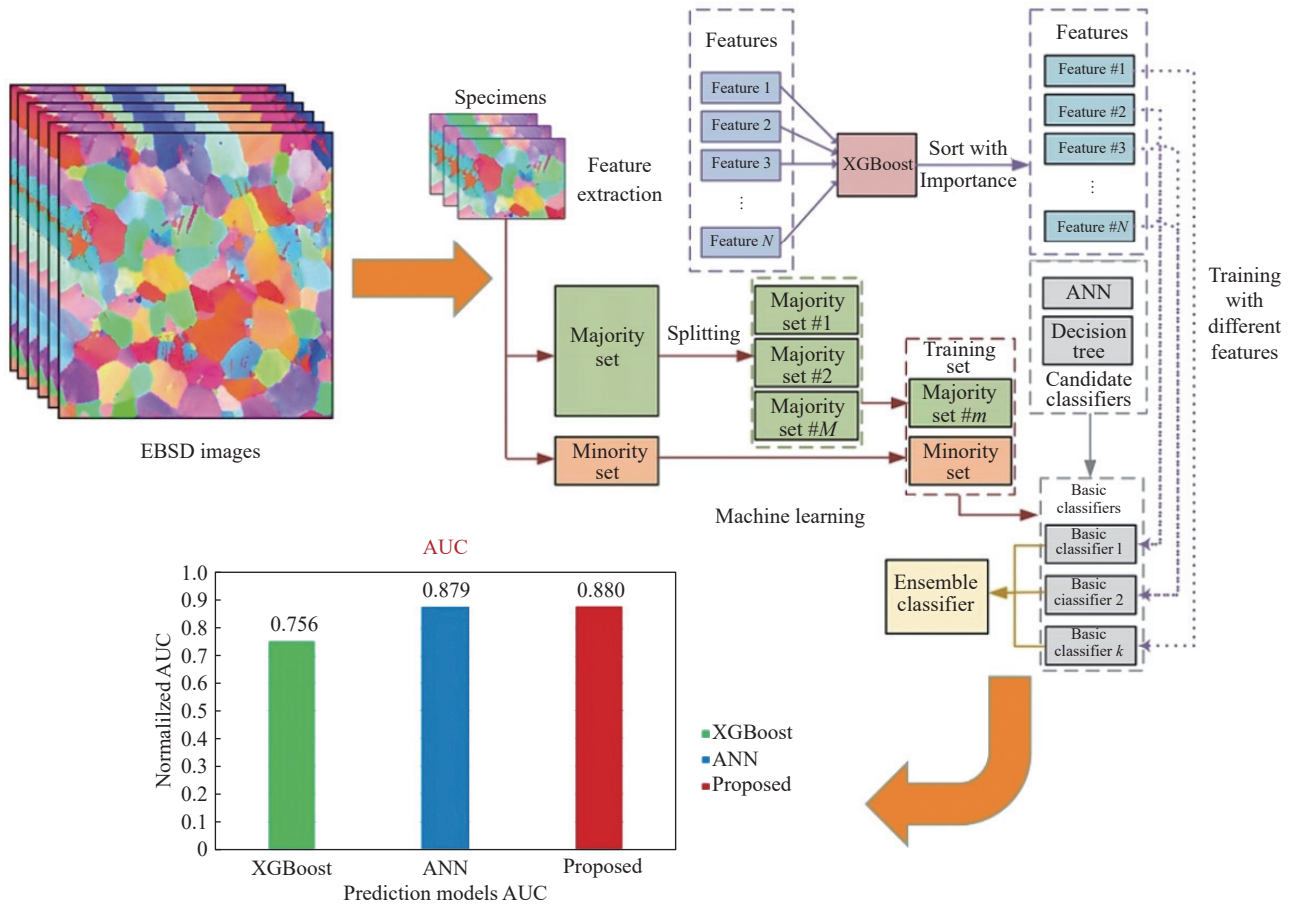


图 8 结合机器学习和 EBSD 方法预测 Mg-RE 合金中的孪晶形核<sup>[67]</sup>

Fig.8 Combined machine learning and EBSD approach for predicting twin nucleation in an Mg-RE alloy<sup>[67]</sup>

过程中的孪晶形核。

### 2.3 逆向设计

逆向设计是给定特定的应用或性能, 输出成分、结构和加工工艺的过程, 能够发现具有特定所需功能的新材料。该领域的相关工作始于无机材料及其晶体结构优化<sup>[68]</sup>, 后续扩展到 316L 不锈钢多轴疲劳寿命预测<sup>[69]</sup>等。逆向设计提供了一种有效的方法, 通过基于已知镁合金性能数据的训练和预测, 加速镁合金新材料的优化和发现。

Mi 等<sup>[70]</sup> 创建了一个反向机器学习设计模型 (Reverse machine learning design model, RMLDM) 来设计高性能和低成本的 Mg-Mn 变形镁合金。逆向设计和 RMLDM 的流程如图 9 所示。选择了 5 种合金元素和 3 种挤压工艺参数作为特征, 创新地利用粒子群优化 (Particle swarm optimization, PSO) 算法对 ANN 的输入进行优化。设计出了四种性能较高的合金, 通过实验验证表明四种合金的性能均接近目标性能, 误差分别为 10.7%、9.7%、8.6% 和 6.3%。提出的 RMLDM 合金设计模型可以用于设计和开发更多新的高性能、低成本的多组分镁合

金, 而不需要预先了解和研究机理。实验证明, 逆向设计可以使用额外的数据进行改进, 并且可以通过更改数据集轻松地应用于其他合金。

### 3 总结与展望

本文综述了机器学习技术在镁合金性能、组织、加工工艺和优化设计中的应用, 表明了机器学习算法在镁合金研究领域极高的适用性, 说明了机器学习在镁合金研究中的巨大潜力。机器学习可以将镁合金本身性质与所需目标性能之间隐藏的关系进行联系, 促进了对镁合金机理更深层次的认知和不同实验条件下的现象解释, 为实验制备和加工工艺提供了清晰、可靠、快速的指导, 加快了高性能镁合金及其部件的研发应用。但是, 目前机器学习对镁合金化学和物理性能的预测还不够全面, 对镁合金部件设计和服役性能的预测才刚刚起步, 缺乏所需数据集的支撑。同时, 机器学习作为材料科学领域的一门新兴技术, 也面临着一些亟待解决的问题, 在此提出了机器学习在镁合金未来应用的研究方向和发展趋势。

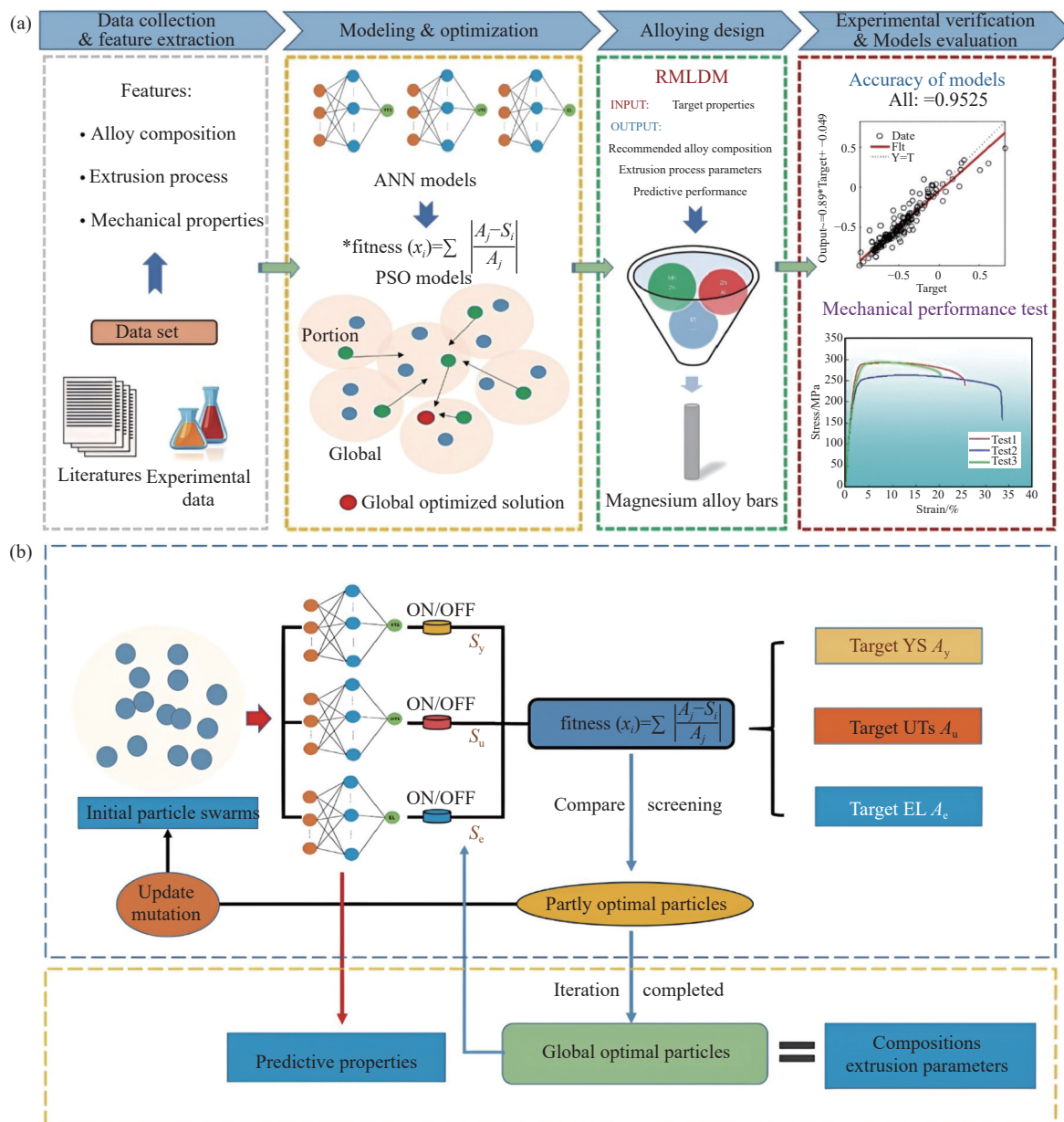


图9 (a) 逆向设计的框架; (b) RMLDM 的工作流程图<sup>[70]</sup>

Fig.9 (a) Reverse design framework; (b) workflow chart of RMLDM<sup>[70]</sup>

(1) 建立完善的镁合金数据库和更智能的数据收集机制. 作为一种数据驱动技术, 机器学习优势和应用效果在很大程度上取决于数据的数量和质量. 现阶段镁合金数据库的缺失造成了数据采集的高成本和低效率问题, 并且从不同来源收集或生成的数据, 会不可避免地产生误差, 从而影响模型的预测精度. 构建完善的数据库和开发统一不同数据标准的自动校正技术, 可以大大提高机器学习的效率, 推动机器学习在材料领域的发展.

(2) 开发新的机器学习算法或探索不同算法之间的集成, 扩大镁合金设计和工程的前沿. 机器学习模型的精度是随着训练数据的数量而提高的,

这意味着模型能够包含更多具有相似结构和组成的材料数据. 通过如迁移学习等的新算法将训练好的模型转移到相似的材料中, 能够提高模型的泛化能力, 扩大使用范围.

(3) 将机器学习与多尺度建模相结合, 以提供对镁合金更全面的理解. 机器学习的预测同时也需要热力学或动力学模型的建模和实验的验证, 积极发挥作为材料人的优势, 将材料领域知识和实验经验与计算机科学相融合, 能够有效地增加机器学习在实际应用中的可操作性.

参 考 文 献

[1] Xu T C, Yang Y, Peng X D, et al. Overview of advancement and

- development trend on magnesium alloy. *J Magnes Alloys*, 2019, 7(3): 536
- [2] Kim J, Pan H B. Effects of magnesium alloy corrosion on biological response—Perspectives of metal-cell interaction. *Prog Mater Sci*, 2023, 133: 101039
- [3] Badkoobeh F, Mostaan H, Rafiei M, et al. Additive manufacturing of biodegradable magnesium-based materials: Design strategies, properties, and biomedical applications. *J Magnes Alloys*, 2023, 11(3): 801
- [4] Xie M, Gan Y, Wang H. Research on new material power strategy by 2035. *Strateg Study CAE*, 2020, 22(5): 1  
(谢曼, 干勇, 王慧. 面向 2035 的新材料强国战略研究. *中国工程科学*, 2020, 22(5): 1)
- [5] Zhao L J, Ma L F, Han T Z, et al. Research progress of wrought magnesium alloy rolling forming. *Mater Rep*, 2020, 34(21): 21135  
(赵磊杰, 马立峰, 韩廷状, 等. 变形镁合金轧制成形研究进展. *材料导报*, 2020, 34(21): 21135)
- [6] Agrawal A, Choudhary A. Perspective: Materials informatics and big data: Realization of the “fourth paradigm” of science in materials science. *APL Mater*, 2016, 4(5): 053208
- [7] Su Y J, Fu H D, Bai Y, et al. Progress in materials genome engineering in China. *Acta Metall Sin*, 2020, 56(10): 1313  
(宿彦京, 付华栋, 白洋, 等. 中国材料基因工程研究进展. *金属学报*, 2020, 56(10): 1313)
- [8] Xie J X, Su Y J, Xue D Z, et al. Machine learning for materials research and development. *Acta Metall Sin*, 2021, 57(11): 1343  
(谢建新, 宿彦京, 薛德祯, 等. 机器学习在材料研发中的应用. *金属学报*, 2021, 57(11): 1343)
- [9] Schleder G R, Padilha A C M, Acosta C M, et al. From DFT to machine learning: Recent approaches to materials science—A review. *J Phys Mater*, 2019, 2(3): 032001
- [10] Jordan M I, Mitchell T M. Machine learning: Trends, perspectives, and prospects. *Science*, 2015, 349(6245): 255
- [11] Kaufmann K, Vecchio K S. Searching for high entropy alloys: A machine learning approach. *Acta Mater*, 2020, 198: 178
- [12] Yang Y, Xiong X M, Chen J, et al. Research advances of magnesium and magnesium alloys worldwide in 2022. *J Magnes Alloys*, 2023, 11(8): 2611
- [13] Suzuki A, Shen C, Chennimalai Kumar N. Application of computational tools in alloy design. *MRS Bull*, 2019, 44(4): 247
- [14] Hatrick-Simpers J R, Gregoire J M, Kusne A G. Perspective: Composition–structure–property mapping in high-throughput experiments: Turning data into knowledge. *APL Mater*, 2016, 4(5): 053211
- [15] Xu X N, Wang L Y, Zhu G M, et al. Predicting tensile properties of AZ31 magnesium alloys by machine learning. *JOM*, 2020, 72(11): 3935
- [16] Wiese B, Berger S, Bohlen J, et al. Property design of extruded magnesium-gadolinium alloys through machine learning. *Mater Today Commun*, 2023, 36: 106566
- [17] Hu Y, Zhang S L, Zhou W H, et al. Studies on perovskite material and its applications via machine learning. *J Chin Ceram Soc*, 2023, 51(2): 452  
(胡扬, 张胜利, 周文瀚, 等. 基于机器学习探索钙钛矿材料及其应用. *硅酸盐学报*, 2023, 51(2): 452)
- [18] Naik D L, Sajid H U, Kiran R. Texture-based metallurgical phase identification in structural steels: A supervised machine learning approach. *Metals*, 2019, 9(5): 546
- [19] Mobarak M H, Mimona M A, Islam M A, et al. Scope of machine learning in materials research—A review. *Appl Surf Sci Adv*, 2023, 18: 100523
- [20] Graser J, Kauwe S K, Sparks T D. Machine learning and energy minimization approaches for crystal structure predictions: A review and new horizons. *Chem Mater*, 2018, 30(11): 3601
- [21] Nick T G, Campbell K M. Logistic regression//*Methods in Molecular Biology*, vol. 404: Topics in Biostatistics. 2007: 273
- [22] McDonald G C. Ridge regression. *Wires Comput Stat*, 2009, 1(1): 93
- [23] Deringer V L, Bartók A P, Bernstein N, et al. Gaussian process regression for materials and molecules. *Chem Rev*, 2021, 121(16): 10073
- [24] Hearst M A, Dumais S T, Osuna E, et al. Support vector machines. *IEEE Intell Syst Appl*, 1998, 13(4): 18
- [25] Sha W, Edwards K L. The use of artificial neural networks in materials science based research. *Mater Des*, 2007, 28(6): 1747
- [26] Barrios, Romero. Decision tree methods for predicting surface roughness in fused deposition modeling parts. *Materials*, 2019, 12(16): 2574
- [27] Li Q, Xia X J, Pei Z B, et al. Long-term corrosion monitoring of carbon steels and environmental correlation analysis via the random forest method. *NPJ Mater Degrad*, 2022, 6: 1
- [28] Kumar M G, Hemanth K, Gangadhar N, et al. Fault diagnosis of welded joints through vibration signals using Naive Bayes algorithm // *International Conference on Advances in Manufacturing and Materials Engineering*. Mangalore, 2014: 1922
- [29] Sathish T, Rangarajan S, Muthuram A, et al. Analysis and modelling of dissimilar materials welding based on K-nearest neighbour predictor // *International Conference on Recent Trends in Nanomaterials for Energy, Environmental and Engineering Applications*. Tiruchirappalli, 2020: 108
- [30] Kumar S S, Anil M, Dhanraj B N. An overview of machine learning, deep learning, and reinforcement learning-based techniques in quantitative finance: Recent progress and challenges. *Appl Sci*, 2023, 13(3): 1956
- [31] Xue D Z, Balachandran P V, Hogden J, et al. Accelerated search

- for materials with targeted properties by adaptive design. *Nat Commun*, 2016, 7: 11241
- [32] Rajak P, Wang B B, Nomura K I, et al. Autonomous reinforcement learning agent for stretchable kirigami design of 2D materials. *NPJ Comput Mater*, 2021, 7: 102
- [33] Hossin M, N S M. A review on evaluation metrics for data classification evaluations. *Int J Data Min Knowl Manag Process*, 2015, 5(2): 1
- [34] Emmert-Streib F, Dehmer M. Evaluation of regression models: Model assessment, model selection and generalization error. *Mach Learn Knowl Extr*, 2019, 1(1): 521
- [35] Tao Q L, Xu P C, Li M J, et al. Machine learning for perovskite materials design and discovery. *NPJ Comput Mater*, 2021, 7: 23
- [36] Stone M. Cross-validators choice and assessment of statistical predictions. *J R Stat Soc Ser B Stat Methodol*, 1974, 36(2): 111
- [37] Lee S Y, Byeon S, Kim H S, et al. Deep learning-based phase prediction of high-entropy alloys: Optimization, generation, and explanation. *Mater Des*, 2021, 197: 109260
- [38] Wang C S, Fu H D, Jiang L, et al. A property-oriented design strategy for high performance copper alloys via machine learning. *NPJ Comput Mater*, 2019, 5: 87
- [39] Wang C C, Wei X L, Ren D, et al. High-throughput map design of creep life in low-alloy steels by integrating machine learning with a genetic algorithm. *Mater Des*, 2022, 213: 110326
- [40] Suh J S, Suh B C, Lee S E, et al. Quantitative analysis of mechanical properties associated with aging treatment and microstructure in Mg–Al–Zn alloys through machine learning. *J Mater Sci Technol*, 2022, 107: 52
- [41] Meng S J, Yu H, Fan S D, et al. Recent progress and development in extrusion of rare earth free Mg alloys: A review. *Acta Metall Sin (Engl Lett)*, 2019, 32(2): 145
- [42] Liu T S, Chen P, Qiu F, et al. Review on laser directed energy deposited aluminum alloys. *Int J Extrem Manuf*, 2024, 6(2): 022004
- [43] Suh J S, Kim Y M, Yim C D, et al. Interpretable machine learning-based analysis of mechanical properties of extruded Mg–Al–Zn–Mn–Ca–Y alloys. *J Alloys Compd*, 2023, 968: 172007
- [44] Hou H B, Wang J F, Ye L, et al. Prediction of mechanical properties of biomedical magnesium alloys based on ensemble machine learning. *Mater Lett*, 2023, 348: 134605
- [45] Bingöl S, Misiolek W. Prediction of the true stress of ZE20 magnesium alloy at different temperatures and strain rates. *Strojnikovski Vestnik J Mech Eng*, 2015, 61(11): 610
- [46] Yu J, Oh S J, Baek S, et al. Predicting the effect of processing parameters on caliber-rolled Mg alloys through machine learning. *Appl Sci*, 2022, 12(20): 10646
- [47] Murugesan M, Yu J H, Chung W, et al. Hybrid artificial neural network-based models to investigate deformation behavior of AZ31B magnesium alloy at warm tensile deformation. *Materials*, 2023, 16(15): 5308
- [48] Lu J, Chen Y, Xu M, et al. Prediction of mechanical properties of Mg-rare earth alloys by machine learning. *Mater. Res. Express*, 2022, 9(10): 106519
- [49] Li M H, Mesbah M, Fallahpour A, et al. Mechanical strength estimation of ultrafine-grained magnesium implant by neural-based predictive machine learning. *Mater Lett*, 2021, 305: 130627
- [50] Huang S J, Mose M P, Kannaiyan S. A study of the mechanical properties of AZ61 magnesium composite after equal channel angular processing in conjunction with machine learning. *Mater Today Commun*, 2022, 33: 104707
- [51] Liu Y W, Wang L Y, Zhang H, et al. Accelerated development of high-strength magnesium alloys by machine learning. *Metall Mater Trans A*, 2021, 52(3): 943
- [52] Sabokpa O, Zarei-Hanzaki A, Abedi H R, et al. Artificial neural network modeling to predict the high temperature flow behavior of an AZ81 magnesium alloy. *Mater Des*, 2012, 39: 390
- [53] Thirumalaikumarasamy D, Balasubramanian V, Sree Sabari S. Prediction and optimization of process variables to maximize the Young's modulus of plasma sprayed alumina coatings on AZ31B magnesium alloy. *J Magnes Alloys*, 2017, 5(1): 133
- [54] Pagadala N D, Jaiswal J, Radha R. Machine learning based corrosion prediction of as cast Mg–Sn alloys for biomedical applications. *Mater Today Commun*, 2023, 35: 106108
- [55] Moses A, Chen D, Wan P, et al. Prediction of electrochemical corrosion behavior of magnesium alloy using machine learning methods. *Mater Today Commun*, 2023, 37: 107285
- [56] Lu Z X, Si S J, He K Y, et al. Prediction of Mg alloy corrosion based on machine learning models. *Adv Mater Sci Eng*, 2022, 2022: 9597155
- [57] Feng D C, Zhou D S, Zhao Z Y, et al. Progress of graphene and loaded transition metals on Mg-based hydrogen storage alloys. *Int J Hydrog Energy*, 2021, 46(67): 33468
- [58] Züttel A. Materials for hydrogen storage. *Mater Today*, 2003, 6(9): 24
- [59] Suwarno S, Dicky G, Suyuthi A, et al. Machine learning analysis of alloying element effects on hydrogen storage properties of AB2 metal hydrides. *Int J Hydrog Energy*, 2022, 47(23): 11938
- [60] Malinova T, Guo Z X. Artificial neural network modelling of hydrogen storage properties of Mg-based alloys. *Mater Sci Eng A*, 2004, 365(1-2): 219
- [61] Rahnama A, Zepon G, Sridhar S. Machine learning based prediction of metal hydrides for hydrogen storage, part I: Prediction of hydrogen weight percent. *Int J Hydrog Energy*, 2019, 44(14): 7337
- [62] Dong S Y, Wang Y Y, Li J Y, et al. Exploration and design of Mg alloys for hydrogen storage with supervised machine learning. *Int*

- J Hydrog Energy*, 2023, 48(97): 38412
- [63] Byun S, Yu J, Cheon S, et al. Enhanced prediction of anisotropic deformation behavior using machine learning with data augmentation. *J Magnes Alloys*, 2024, 12(1): 186
- [64] Guan B, Chen C, Xin Y C, et al. Predicting the Hall–Petch slope of magnesium alloys by machine learning. *J Magnes Alloys*, 2023
- [65] Mi X X, Jing X R, Wang H L, et al. A machine learning enabled ultra-fine grain design strategy of Mg–Mn-based alloys. *J Mater Res Technol*, 2023, 23: 4576
- [66] Zhang S, Zhu G M, Fan Y H, et al. A machine learning study of grain boundary damage in Mg alloy. *Mater Sci Eng A*, 2023, 867: 144721
- [67] Gui Y W, Li Q A, Zhu K G, et al. A combined machine learning and EBSD approach for the prediction of {10-12} twin nucleation in an Mg–RE alloy. *Mater Today Commun*, 2021, 27: 102282
- [68] Jabbar R, Jabbar R, Kamoun S. Recent progress in generative adversarial networks applied to inversely designing inorganic materials: A brief review. *Comput Mater Sci*, 2022, 213: 111612
- [69] Sun X Y, Zhou K, Shi S W, et al. A new cyclical generative adversarial network based data augmentation method for multiaxial fatigue life prediction. *Int J Fatigue*, 2022, 162: 106996
- [70] Mi X X, Tian L J, Tang A T, et al. A reverse design model for high-performance and low-cost magnesium alloys by machine learning. *Comput Mater Sci*, 2022, 201: 110881