

机器学习在高熵合金研究中的应用进展

丁红瑜¹ 付衡² 秦红敏² 张琪² 黄虎³ 陈超¹

(1. 江苏科技大学海洋装备研究院, 镇江 212000; 2. 江苏科技大学材料科学与工程学院, 镇江 212000;
3. 吉林大学数控装备可靠性教育部重点实验室, 长春 130022)

摘要 机器学习凭借在高维特征处理与非线性建模方面的优势, 被广泛应用于高熵合金的成分筛选、相结构预测、力学与功能性能调控以及服役行为建模。系统梳理了相关研究进展, 重点评述了相形成预测的特征工程与多模型集成方法, 多目标优化在强度-延展性权衡中的应用, 以及腐蚀性能和软磁性能的建模与验证。同时, 总结并提出了数据稀缺、跨尺度建模和物理解释性不足等突出问题, 并探讨了图神经网络、自监督学习、因果推理及试验反馈闭环等新兴路径。

关键词 高熵合金; 机器学习; 相形成预测; 多目标优化; 性能调控

中图分类号 TG156.1; TG146.1 **文献标志码** A **DOI**: 10.15980/j.tzzz.Z20250011

Application Progress in Machine Learning in High Entropy Alloys

DING Hongyu¹, FU Heng², QIN Hongmin², ZHANG Qi², HUANG Hu³, CHEN Chao¹

(1. Marine Equipment and Technology Institute, Jiangsu University of Science and Technology, Zhenjiang 212000; 2. College of Materials Science and Engineering, Jiangsu University of Science and Technology, Zhenjiang 212000; 3. Key Laboratory of CNC Equipment Reliability, Ministry of Education, Jilin University, Changchun 130022)

Abstract: Machine learning (ML) has been widely applied to HEAs for composition screening, phase structure prediction, mechanical and functional property optimization, and service behavior modeling due to the advantages in high-dimensional feature handling and nonlinear modeling. The recent progress were systematically reviewed, and feature engineering and multi-model integration method for phase formation prediction, multi-objective optimization strategies to balance strength and ductility, as well as data-driven modeling and verification of corrosion and soft magnetic performance were emphasized. Current challenges including data scarcity, cross-scale transferability, and insufficient physical interpretability were also summarized. Furthermore, emerging approaches including graph neural networks, self-supervised learning, causal reasoning, and experimental feedback loops were discussed.

Key Words: HEAs, Machine Learning, Phase Formation Prediction, Multi-objective Optimization, Performance Regulation

材料科学作为现代工业发展的核心学科, 其创新能力直接影响机械制造、能源、交通、航空航天及国防安全等关键领域。然而, 传统材料研发长期依赖经验性试错与渐进式优化模式, 导致新材料从实验室设计到产业应用常需经历漫长且高成本的研发过程。提升新材料开发效率、缩短研发周期、加快性能迭代, 已成为当前全球材料科学界亟待突破的重要瓶颈。

高熵合金 (High-entropy alloys, HEAs) 作为材料设计范式转变的重要成果, 自 YE H J W 等^[1] 和 CANTOR B 等^[2] 提出以来, 因其独特的合金设计理念

与卓越性能引起了全球广泛关注。与传统“主元素+微量合金化”体系相比, 高熵合金通过引入 5 种或更多近等摩尔比的主元素, 实现了组分熵增效应与固溶体稳定性的协同。在宏观性能层面, 高熵合金已在高温强韧性、耐腐蚀性、抗辐照性、软磁性能及生物医用兼容性等方面展现出优异的综合性能, 为复杂服役环境下的新型结构-功能一体化材料开发提供了重要候选体系。

然而, 高熵合金庞大的组分自由度与不同条件下的复杂相转变问题也极大增加了成分设计与组织调控的难度。单纯依赖传统热力学判据与高通量试验难以

收稿日期: 2025-06-26; 修订日期: 2025-09-21

基金项目: 镇江市国际合作资助项目 (GJ2023011)

第一作者: 丁红瑜, 男, 1984 年出生, 副教授, E-mail: dinghongyu2018@just.edu.cn

引用格式: 丁红瑜, 付衡, 秦红敏, 等. 机器学习在高熵合金研究中的应用进展 [J]. 特种铸造及有色合金, 2026, 46(6): 801-807.

DING H Y, FU H, QIN H M, et al. Application progress in machine learning in high entropy alloys [J]. Special Casting & Nonferrous Alloys, 2026, 46(6): 801-807.

有效覆盖整个组分-工艺-性能空间。因此,在高维复杂体系中高效识别关键影响因子、构建准确的预测模型,并实现多性能指标协同优化正成为高熵合金智能设计所面临的核心问题。

近年来,人工智能(Artificial intelligence, AI)技术在工程与自然科学多个领域中加速渗透,材料学作为其中的重要方向,也逐步形成了以数据驱动方法为核心的研究新格局。在材料基因工程与人工智能技术发展的双轮驱动下,机器学习(Machine learning, ML)凭借其强大的非线性映射与高维特征处理能力,已逐步成为高熵合金设计与性能预测的重要工具。从早期的相形成判据修正,到复杂力学与功能性能的多目标优化,再到近期图神经网络、迁移学习与因果建模方法的引入,在相形成判据与多目标性能优化等典型任务中,机器学习已逐步替代经验法则,建立起以数据驱动模型为基础、融合物理机制解释的研究范式,推动高熵合金设计向更具系统性与可迁移性的方向演进。在此过程中,机器学习与传统唯象理论逐渐融合形成了新一代数据驱动理论体系。赵鼎祺等^[3]指出,机器学习本质上可视作对试验数据结果的经验抽象,属于广义唯象模型体系,类似于牛顿万有引力定律背后的开普勒定律,通过大数据中提炼统计规律建立模型,在缺乏精确物理方程时仍可指导新材料开发。同时,机器学习在高熵合金体系的应用亦逐步形成了3大典型任务分支:材料属性预测、新材料发现与制造工艺优化,使其在高熵合金设计流程中渗透愈发深入。陈巧冰等^[4]在轻质高熵合金体系研究中,充分利用机器学习在特征筛选、相结构判别及性能预测等多任务领域的协同能力,通过XGBoost、SHAP可解释性分析等算法,系统梳理了特征变量对轻质HEAs稳定性与性能贡献度的排序逻辑,验证了机器学习方法在复杂组元体系精准设计中的适用性与机制揭示能力,为后续复杂合金体系设计提供了参考。

本综述梳理机器学习在高熵合金设计与开发过程中的核心应用,包括相形成判定模型、多目标性能优化、腐蚀与服役行为预测,以及模型在数据质量、特征构造、物理解释性与反馈闭环建模等方面的主要挑战,并讨论图神经网络、自监督学习、主动学习、试验反馈-机器学习耦合等新兴技术体系在未来高熵合金智能设计流程中的潜在应用价值,为高熵合金的后续工业应用提供参考。

1 高熵合金的相形成

高熵合金的相结构形成机制复杂,受多种因素影

响,包括原子半径差异、混合焓以及价电子浓度等,其共同影响固溶体与金属间化合物的相对稳定性。在合金设计过程中,结构类型的确定不仅影响成分筛选策略,也直接关系到材料的组织调控与最终性能实现。因此,建立系统、准确的相形成预测方法是高熵合金设计的重要前置环节。

针对高熵合金复杂组元体系下的结构演化问题,传统研究主要依赖原子半径差(δ)、混合焓(ΔH_{mix})、熵增(ΔS_{mix})以及价电子浓度(VEC)等经验性指标作为固溶体形成判据。ZHANG Y等^[5]构建了原子半径差-混合焓(δ - ΔH_{mix})图谱,指出当原子尺寸差异 δ 小于6%、混合焓 ΔH_{mix} 介于 $-15\sim 5$ kJ/mol时,合金更倾向形成固溶体结构;而当原子尺寸差异 δ 较大,负混合焓 ΔH_{mix} 较大时则易形成非晶结构。GUO S等^[6]提出了基于价电子浓度(VEC)的判据模型,认为 $\text{VEC}\geq 8.0$ 时易形成FCC结构, $\text{VEC}< 6.87$ 时倾向形成BCC结构,VEC介于二者之间则倾向于形成FCC+BCC双相结构。在ZHANG Y等^[5]研究基础上,考虑到元素原子半径分布的密集和均匀程度,DING H Y等^[7]补充提出 δ' 参数用于表征元素尺寸分布规律,当 $\delta'< 2.2$ 时易形成FCC结构; δ' 为 $2.2\sim 2.9$ 时易形成FCC+BCC结构; δ' 为 $2.9\sim 4.9$ 时易形成FCC结构; $\delta'> 4.9$ 则更易形成非晶结构。这些判据虽能在特定范围内提供相稳定性预判,但受限于维度较低、依赖静态经验准则,难以适应成分更复杂、结构多样化的合金体系,尤其对包含亚稳结构与金属间化合物(如FCC+IM或BCC+IM)等情况识别能力仍显不足。

随着高熵合金数据库的不断扩展与建模工具的升级迭代,研究者开始将机器学习方法应用于合金相结构的预测分析中。早期研究表明,与依赖经验判据的 δ - ΔH_{mix} 、VEC等指标相比,传统分类算法(如随机森林、支持向量机等)在固溶体判别任务中已能取得更高的预测精度^[8],体现了机器学习方法在复杂体系中的优势,见表1。在此基础上,进一步提出了涵盖数据预处理、特征构建与交叉验证的建模流程,见图1^[9],为实现预测与试验验证的联动奠定了方法学基础。

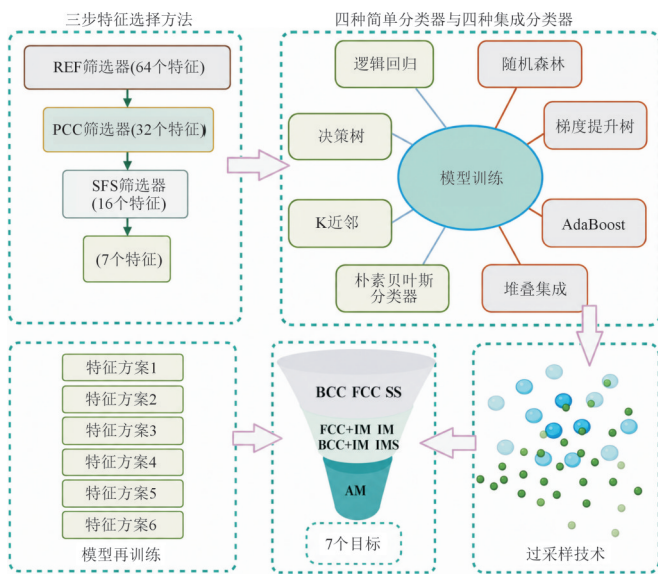
在高通量计算与数据库建设的推动下,研究者进一步将机器学习应用于多相结构判别。相关工作表明,结合CALPHAD计算结果与多分类模型训练,可在多相体系判别中展现出较高的预测精度^[10]。同时,研究还探索了深度学习与量子计算结合的新兴路径,如基于量子变分分类器的混合模型^[11],显示出在小样本条件下依然具备稳定的分类能力,拓展了未来复杂体系研究的方法学方向。SUN Y B等^[12]系统评述了近年来在多组元合金结构建模中涌现的先进机器学习方

表1 高熵合金相结构预测方法对比

Tab.1 Comparison of phase structure prediction methods for

HEAs

	传统经验判据	机器学习预测模型
输入数据	单一合金成分	本次合金成分+已发表的成百上千篇文献中成分-相对应关系
处理过程	简单数学运算, 计算 δ - ΔH_{mix} 、VEC、 δ' 等	利用RF、SVM、KNN等机器学习算法进行复杂运算
判断依据	与经验图谱/参数范围对照	运算结果
输出结果及准确性	形成相预测, 准确率较低, 不能很好识别 FCC+IM 或 BCC+IM 等特殊情况	形成相预测, 准确率高, 部分可达90% 甚或95% 以上

图1 高熵合金相结构预测的机器学习建模流程图^[9]Fig.1 Flow chart of machine learning modeling of phase structure prediction for high-entropy alloys^[9]

法,包括图神经网络(GNN)、图结构增强的Transformer模型、迁移学习框架,以及用于提高模型可解释性的SHAP分析工具。相关方法通过显式编码原子间的拓扑关联特征,可实现从原始结构到目标性质的端到端建模,尤其适用于捕捉复杂组元体系中非线性结构响应关系。同时指出,将此类模型与高通量数据库联用进行多尺度数据挖掘是实现高熵合金精准建模与高效筛选的重要策略方向。ZHANG H R等^[13]提出了一种端到端结构的机器学习框架,构建包含 δ 、 C_{VE} 等多个热力学变量的特征池,并通过集成模型池实现对多结构类型的并行分类建模。在5类典型相结构分类任务中,该方法在测试集上达到87.8%的准确率,验证了联合特征表示与模型协同的有效性。此外,LIU X L等^[14]指出,高熵合金相关数据库在特征定义、采样方式等方面尚存在人为选择倾向,导致数据源间一致性较差、模型泛化性能不稳定。为提升模型在实际应用场景下的适应性,研究者需重点关注特征标准化方法、多

源数据融合机制以及模型输出的结构可解释性。

在现有基础上,研究者进一步从特征工程与算法集成角度深化了相形成预测模型的方法。张猛等^[15]扩展出包含19种特征的高维参数体系,系统涵盖了原子尺寸误配、混合焓、电负性差、弹性模量误配、堆叠因子等关键描述符,通过集成SVM、ANN、KNN与Ensemble算法联合建模,显著提升了复杂亚稳相与多相共存区间下的分类精度。张聪等^[16]提出结合高通量第一性原理(SQS、SSOS、PSSOS法)与机器学习集成模型,可有效利用短程有序度、界面能、堆垛层错能等物理因子提升模型物理一致性与跨体系泛化能力。赵鼎祺等^[3]系统性总结了皮尔逊系数(PCC)、主成分分析(PCA)与递归特征消除(RFE)在复杂高维特征空间下的降维冗余剔除效果,强调合理平衡特征数量与信息维持度是避免模型复杂度膨胀、提升训练稳定性的关键要素。文成^[17]构建了“特征构造-遗传算法筛选-试验反馈-自适应迭代”闭环优化框架,配合贝叶斯优化与模型动态调整,在多组元体系复杂组分筛选任务中取得了良好应用效果。

从整体趋势看,高熵合金相形成预测正由早期低维静态经验模型向多维特征融合、物理机制嵌入、多模型集成及试验反馈闭环演进,系统提升了对复杂组分体系中亚稳相、多相共存区间的识别与建模能力。

2 高熵合金的性能优化

高熵合金因其独特的组元复杂性与固溶体稳定机制,在结构强度、硬度、延展性、耐磨性、磁性能与耐腐蚀性等多性能维度表现出优异的综合特性。然而,不同性能指标间往往存在内在耦合甚至相互制约,实现多性能指标协同优化仍是高熵合金设计中具有挑战性的任务。传统的试错式试验筛选难以高效探索如此高维度、多目标的设计空间,机器学习技术由此成为突破性能优化瓶颈的重要途径。

在力学性能调控任务中,实现屈服强度与延展性的协同提升是高熵合金结构设计的关键挑战之一。WU S W等^[18]采用激光粉末床熔融增材制造(LPBF)工艺,在高Al+Ti含量的Ni基体系中构建了物理试验数据库,并结合微观强化机制建模,成功设计出屈服强度超过1.2 GPa的高强韧合金,体现出试验与理论联合驱动的可行性。YU L P等^[19]结合分子动力学模拟与随机森林回归算法,预测了CrFeCoNiV合金在多温度条件下的屈服行为,其模型结果与应力-应变试验曲线高度吻合,验证了机器学习方法在微观机制建模中的适用性。

针对强度与延展性难以兼得的难题, ZHANG Y 等^[20]引入非支配排序遗传算法(NSGA-II)多目标优化框架, 基于高维特征空间筛选出同时满足2 000 MPa强度与30%延展性的优选成分组合, 展示了多性能协同优化算法在新材料开发中的实际搜索能力, 见图2。在难熔高熵合金设计中, 高田创等^[21]通过强化机制建模量化了屈服强度、弹性模量与断裂韧性之间的多性能关联关系, 提出在强化模型基础上引入遗传算法与强化学习方法, 实现多性能目标空间内的协同优化搜索, 为难熔HEA体系的强韧性优化提供了有效理论与方法支持。此外, PEI Z R等^[22]构建了基于词向量嵌入的语义表示模型, 以刻画不同元素之间的语义相似性。研究者通过提取元素上下文向量, 实现了组元语义特征的量化表达, 并据此提出了一种面向新合金体系前期成分筛选的自然语言处理框架。该方法不依赖试验或计算结果, 可在缺乏标签数据的早期阶段辅助发现潜在互补组元, 为数据驱动的高通量合金设计拓展了新的路径。

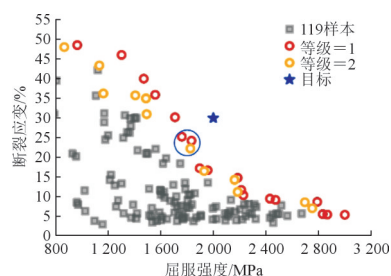


图2 多目标机器学习优化结果在屈服强度-断裂应变空间中的分布图^[20]

Fig.2 Distribution of multi-objective ML optimization results in yield strength-fracture strain space^[20]

近年来, 研究者进一步尝试将嵌入表示与迁移学习结合, 以提升高维特征空间下的建模稳定性与任务迁移能力。有研究在Ni基合金的熔点预测任务中采用基于注意力机制的升维嵌入方法, 并结合预训练-微调流程, 在低熔点等关键区间表现出更高的预测精度, 并在反向优化设计中优于传统贝叶斯优化^[23]。另一项针对Nb-Si多组元合金的工作则表明, 不同性质的预测任务需要匹配差异化的模型与特征策略: 离散嵌入结合迁移学习在置换能预测上效果最佳, 而随机森林结合特征筛选在键长变化建模中更具优势^[24]。研究表明, 面向高维特征的嵌入与迁移学习正在成为多组元合金机器学习的重要方向, 为高熵合金的复杂性能预测提供借鉴。在弹性模量预测方面, ZHU C S等^[25]采用布谷鸟搜索算法(Cuckoo search, CS)优化随机森林模型的超参数设置, 并在多组高熵合金数据集上构建了弹性模量回归预测框架。相比常规调参策略, 该方法在

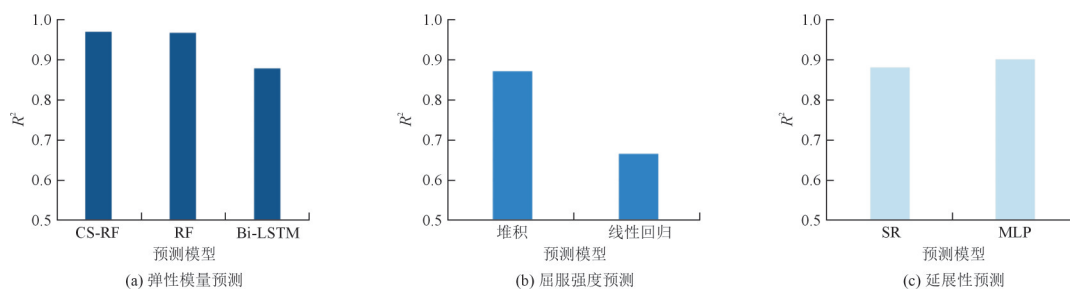
不同体系间保持较高拟合精度的同时提升了模型稳定性, 展现出良好的跨体系泛化能力。相关模型可用于快速筛选满足特定模量要求的合金候选组分, 为大規模性能评估提供了有效工具支持。

此外, 硬度作为小样本评价和快速筛选的重要指标, 近年来也逐渐进入机器学习建模体系。刘轶等^[26]利用154组6061铝合金试验数据构建了包含成分特征与物理性质衍生特征的高维数据库, 并在多模型比较中随机森林模型结合“成分-性质”复合特征时获得最优预测精度, 维氏硬度预测值与试验值之间的均方根误差(RMSE)约为4~8.5 HV。通过SHAP与PDP等可解释性工具, 揭示了Si、Cu的对立效应以及Zn-Cr之间的耦合规律, 进一步展示了在小样本条件下实现高精度预测和机制解析的可行性。该工作表明, 机器学习在传统多元合金体系中同样能够识别关键成分效应并提炼通用规律。

HUANG X Y等^[27]采用符号回归(Symbolic regression)方法构建了面向断裂应变预测的显式表达模型, 模型结构中引入了空位形成能、位错塞积/移动系数、Pugh模量比及液相范围等关键物理参数。在不依赖深层神经网络结构的前提下, 该模型可提供具体数学形式, 有助于理解特征变量与延展性之间的非线性关系。通过对模型结构项与系数的分析, 明确指出上述参数对合金延展性具有主导性影响。此外, 还强调在工程可用性导向下, 性能预测模型应同时兼顾准确性与结构透明度, 以便为后续设计优化提供可靠解释依据。

已有研究对比了多种机器学习模型在不同性能预测任务中的表现。集成学习方法[如布谷鸟搜索优化随机森林(CS-RF)和随机森林(RF)]在弹性模量预测中精度较高, 深度学习模型[如多层感知机(MLP)和双向长短期记忆网络(Bi-LSTM)]在延展性预测中具有明显优势, 而在屈服强度预测中, 多模型集成方法[如堆叠集成(Stacking)]与深度学习方法表现出更强的潜力, 见图3。线性回归在各类任务中的拟合精度均偏低。综上, 不同算法在不同预测任务中各有优势, 提示未来需要结合性能特征与模型适配, 避免一刀切地套用单一算法^[19,25,27]。

在功能性能方面, 已有研究提出“数据-模型-试验”一体化的框架。GUO W H等^[28]将机器学习深度应用于Fe基软磁合金的设计, 该方法通过大规模数据驱动的建模与试验验证, 突破了饱和磁感应强度与矫顽力之间的传统矛盾, 最终实现了性能超越商业化材料的Fe基非晶/纳米晶合金。这一结果不仅验证了机器学习在功能材料研发中的有效性, 也表明其有望从辅助

图3 不同机器学习模型在高熵合金性能预测任务中的代表性结果对比^[19,25,27]Fig.3 Representative results of different machine learning models in high-entropy alloy property prediction tasks^[19,25,27]

工具演变为推动材料创新的核心驱动力,进一步凸显了其在推动新一代高性能功能材料设计中的潜力。

高熵合金的耐蚀性能在能源、化工等复杂服役环境中具有重要意义,近年来已有多项研究尝试通过数据驱动方式对其腐蚀行为进行建模。ROY A等^[29]构建了结合梯度提升回归(Gradient boosting regression)与特征选择策略的腐蚀速率预测模型,识别出电负性差异、形成焓等关键变量,为腐蚀行为的定量建模提供了参数基础。WANG Y F等^[30]基于自动图像识别与XRD联合试验平台,对Cr-Fe-Ni-Mn合金在熔盐介质中的腐蚀过程进行建模,并实现了试验数据向模型反馈的闭环流程,有助于提升建模结果与实际腐蚀行为的一致性。此外,OZDEMIR H C等^[31]通过构建腐蚀特征向电化学响应的机器学习映射模型,开发出可预测合金钝化性能的方法,并在后续测试中得到了试验验证。SASIDHAR K N等^[32]引入文本编码策略,将工艺变量(如热处理制度、测试介质等)转换为可学习的语义特征,结合深度神经网络完成腐蚀电位预测,展示了该方法在处理多源异构输入中的可行性与适应性提升效果。

第一性原理计算与机器学习结合的研究也在不断拓展新的方向。TANG Y C等^[33]针对Nb₅Si₃合金的合金化稳定性,提出了一种结合“中心-环境”特征与预定义注意力机制的建模方法。该研究在置换能预测中实现了较高精度,预测值与计算值之间的平均绝对误差为0.329 eV(按计算晶胞计),并利用SHAP分析揭示了凝聚能、体模量等关键特征对结构稳定性的主导作用。此外,该模型在a-Nb₅Si₃训练后能够有效迁移至b-Nb₅Si₃的预测,展现了良好的跨结构可转移性。这表明,将第一性原理计算数据与物理先验驱动的注意力机制耦合,是推动复杂合金体系机理解析与设计的重要方向。此外,在熔模铸造场景中已有工作将试验数据与数值仿真联用,并以机器学习对温度场、冷却速率与合金成分等关键参量实施联合优化,报道了缺陷率下降、组织与力学性能指标同步提升的效果,体现出“数据-模型-工艺”一体化优化的可行路径^[34]。

综上,高熵合金性能优化的研究正逐步由以单一

力学指标为导向的局部改进策略,向兼顾强度、延展性、耐蚀性等多性能需求的协同设计模式演进。在机器学习方法的支持下,研究者已围绕高维特征建模、多目标回归分析、语义嵌入筛选以及试验反馈机制等方面构建了初步框架,并在强度-延展性等性能权衡上的预测与优化中展现出应用潜力。整体而言,现有模型的跨体系泛化性与可解释性仍有待加强,如何在多性能协同优化中实现更稳定的迁移学习与试验验证仍是未来的重要挑战。

3 面临的挑战与未来发展方向

尽管机器学习(ML)在高熵合金(HEAs)设计方面展示了加速材料发现的强大潜力,但仍面临数据、模型及物理解释3大层面的核心挑战。

(1)高维化学空间与数据稀缺 HEAs的化学成分空间异常庞大,复杂的成分组合导致传统ML方法面临“灾难维度”与数据覆盖不足问题。数据集中可能存在同一性能由不同结构原因造成的“非单一映射”,同结构下不同性能表现也可能存在巨大差异,这令生成式模型对非线性映射的结构差异难以收敛。小样本预测往往过度拟合,仅依赖现有数据难以扩展。应积极采用迁移学习、数据增强与不确定性估计来提升模型泛化性能。RAO Z Y等^[35]指出,当前HEAs相关数据集普遍存在样本数目不足、标签准确度与测噪声并存等现象,直接影响模型的泛化能力与稳定性。与这一思路相呼应,高通量电弧熔炼已在多成分合金中得到应用,并形成了可量化的强度-组织证据链。对Mo-Re体系的大样本筛选揭示了固溶强化与细晶强化的分区主导,为后续的特征选择与物理先验提供了直接支撑^[36]。上述研究为高熵合金数据库的结构化建设与开放共享、图像-文本-结构多源数据的互通转化,以及统一大规模高熵合金数据库体系的构建提供了基础支撑。在工程应用中,模型安全性和可靠性尤为核心,需要结合不确定性定量,提供试验可信区间并判断预测可用范围。

(2)从原子尺度到宏观性能的跨尺度建模是一种

巨大的挑战。传统构成特征(如平均原子半径、熵/焓差等)在多组元合金、跨尺度条件下的描述能力不足。为此,研究者提出基于图神经网络(GNN)的局部结构嵌入方法,能自动捕捉短程与长程有序性,然而,模型解释性依然较弱,为提升预测的可解释性与物理一致性,需引入相图特征、畸变能等显式物理量作为先验变量,并采用解释型算法(SHAP、局部特征归因等)验证预测机制。ML在原子/晶体尺度(如预测相结构、界面缺陷行为)上已有成功案例,如使用ML势模型结合Monte Carlo模拟揭示NbMoTaW合金的BCC相稳定性^[37]。然而,跨尺度问题仍未解决,如何将原子层预测的自由能、缺陷概率等量化结果整合到宏观材料属性预测(如力学、磁性、耐腐蚀性)中仍存在问题。未来研究可强化逆向设计策略:通过深度生成模型(如VAE、GAN)反向搜索满足结构-性能目标的化学配方,并用试验或CALPHAD辅助验证。

(3)当下,多数ML模型关注统计相关性,与物理模型解释之间缺乏深入的关联。如软磁材料中,塑造非晶/纳米晶界面的物理机理已被试验观测到,但ML模型缺乏内在结构理解,可谓知其然不知其所以然。近期研究尝试使用因果建模+主动学习的形式,以迭代试验为反馈更新ML模型,但多出现于简单体系,HEAs高复杂性仍未突破。未来可以进一步加强物理驱动模拟-试验闭环平台建设,如在模型指导下逐步调整合金成分比例、热处理及服役条件等关键参数,并在此过程中引入高通量试验/表征作为验证与反馈环节,一方面可快速验证机器学习模型预测的可行性,另一方面在发现偏差时提供纠偏数据,不断提升模型的泛化能力与稳健性。已有研究表明,在高熵合金体系中,结合机器学习预测与高通量试验筛选能够显著加速硬质合金的开发进程,并成功发现多种超硬HEA^[38],充分展现了数据-模型-试验闭环的潜力。这一方向的持续推进,将为高熵合金的高效设计和工程应用提供坚实的技术支撑。

4 总 结

高熵合金因其独特的组分设计理念和优异的综合性能,已成为新一代结构-功能一体化材料的重要候选体系。但其庞大的成分空间和复杂的相稳定性调控机制,使设计与性能预测长期面临效率低、成本高的瓶颈。综述了机器学习在高熵合金研究中的典型应用进展,涵盖相形成判定、多目标性能优化、腐蚀与软磁性能建模等关键环节。相关研究表明,机器学习能够突破传统经验判据和试错试验的局限,在提高预测精度、

实现多性能协同优化以及建立数据-模型-试验联动方面展现出明显优势。同时,数据稀缺、跨尺度关联不清和模型可解释性不足等问题依然突出。未来的研究应在3个方面加强:①建立高质量、标准化且开放共享的数据库,系统收录完整试验数据,包括成功、失败试验结果及未达到预期性能的样本数据。②发展结合第一性原理、分子动力学与高通量试验的跨尺度建模方法,增强模型的物理一致性和泛化能力。③构建试验-建模-优化的闭环迭代体系,以主动学习和不确定性量化为支撑,实现对高熵合金服役性能的可控调节。通过以上努力,有望逐步形成面向实际工况的智能化设计范式,加速高熵合金从理论研究走向工程应用。

参 考 文 献

- [1] YE H J W, CHEN S K, LIN S J, et al. Nanostructured high-entropy alloys with multiple principal elements: novel alloy design concepts and outcomes [J]. *Advanced Engineering Materials*, 2004, 6(5): 299-303.
- [2] CANTOR B, CHANG I T H, KNIGHT P, et al. Microstructural development in equiatomic multicomponent alloys [J]. *Materials Science and Engineering*, 2004, A375-377: 213-218.
- [3] 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): 508-517.
- [4] 陈巧冰, 赫梓建, 刘璇, 等. 机器学习在轻质高熵合金设计中的应用 [J]. *桂林电子科技大学学报*, 2024, 44(3): 237-245.
- [5] ZHANG Y, ZHOU Y J, LIN J P, et al. Solid-solution phase formation rules for multi-component alloys [J]. *Advanced Engineering Materials*, 2008, 10(6): 534-538.
- [6] GUO S, NG C, LU J, et al. Effect of valence electron concentration on stability of fcc or bcc phase in high entropy alloys [J]. *Journal of Applied Physics*, 2011, 109(10): 103 505.
- [7] DING H Y, LUAN H W, BU H T, et al. Designing high entropy bulk metallic glass (HE-BMG) by similar element substitution/addition [J]. *Materials*, 2022, 15: 1 669.
- [8] JAIN R, JAIN S, DEWANGAN S K, et al. Machine learning-driven insights into phase prediction for high entropy alloys [J]. *Journal of Alloys and Metallurgical Systems*, 2024, 8: 100 110.
- [9] LIU G Y, WU Q Q, MA Y, et al. Machine learning-based phase prediction in high-entropy alloys: Further optimization of feature engineering [J]. *Journal of Materials Science*, 2025, 60: 3 999-4 019.
- [10] BANSAL A, KUMAR P, YADAV S, et al. Accelerated design of high entropy alloys by integrating high throughput calculation and machine learning [J]. *Journal of Alloys and Compounds*, 2023, 960: 170 543.
- [11] BROWN P, ZHUANG H L. Quantum machine-learning phase prediction of high-entropy alloys [J]. *Materials Today*, 2023, 63: 18-31.
- [12] SUN Y B, NI J. Machine learning advances in high-entropy alloys: A mini-review [J]. *Entropy*, 2024, 26: 1 119.
- [13] ZHANG H R, HU R, LIU X, et al. An end-to-end machine learning framework exploring phase formation for high entropy alloys [J]. *Transactions of Nonferrous Metals Society of China*, 2023, 33: 2 110-2 120.
- [14] LIU X L, ZHANG J X, PEI Z R. Machine learning for high-entropy

- alloys: Progress, challenges and opportunities[J]. Progress in Materials Science, 2023, 131: 101-118.
- [15] 张猛, 花福安, 赵巍. 基于机器学习的高熵合金生成相预测研究[J]. 材料导报, 2021, 35(S1): 331-335.
- [16] 张聪, 刘杰, 解树一, 等. 高通量计算与机器学习驱动高熵合金的研究进展[J]. 材料工程, 2023, 51(3): 1-16.
- [17] 文成. 基于机器学习的高熵合金成分设计与性能优化[D]. 北京: 北京科技大学, 2022.
- [18] WU S W, CHIA H Y, ZHANG T L, et al. A precipitation strengthened high entropy alloy with high (Al+Ti) content for laser powder bed fusion: Synergizing intrinsic hot cracking resistance and ultrahigh strength[J]. Acta Materialia, 2023, 258: 119-193.
- [19] YU L P, ZHAI J R, CAO W Z, et al. Prediction of temperature-dependent yield strength of refractory high entropy alloy based on stacking integrated framework[J]. Journal of Materials Informatics, 2024, 4: 28.
- [20] ZHANG Y, XIN S W, ZHOU W, et al. A multi-objective feature optimization strategy for developing high-entropy alloys with optimal strength and ductility [J]. Materials Genome Engineering Advances, 2025, 3: e70 000.
- [21] 高田创, 高建宝, 李谦, 等. 机器学习驱动难熔高熵合金设计的现状与展望[J]. 材料工程, 2024, 52(1): 27-44.
- [22] PEI Z R, YIN J Q, LIAW P K, et al. Toward the design of ultrahigh-entropy alloys via mining six million texts [J]. Nature Communications, 2023, 14: 54.
- [23] GAO J, GAO Z H, FAN X, et al. Transfer learning of high-dimensional features via attention-based embedding for Ni-based superalloys[J]. Journal of Applied Physics, 2025, 138: 024 902.
- [24] 高珺, 唐宇超, 方李鑫, 等. 基于降维和升维特征的多组元 Nb-Si 合金的能量和结构的机器学习[J]. 特种铸造及有色合金, 2025, 45(8): 1 164-1 172.
- [25] ZHU C S, LI G Z, LUIS N V J, et al. Optimization of RF to alloy elastic modulus prediction based on cuckoo algorithm [J]. Computational Materials Science, 2024, 231: 112-1515.
- [26] 刘轶, 余童昕, 李卓颖, 等. 基于机器学习 6061 铝合金成分-硬度关系预测与设计[J]. 特种铸造及有色合金, 2025, 45(8): 1 136-1 147.
- [27] HUANG X Y, ZHENG L, XU H B, et al. Predicting and understanding the ductility of BCC high entropy alloys via knowledge-integrated machine learning [J]. Materials & Design, 2024, 239: 112 797.
- [28] GUO W H, WU Y, SHI L X, et al. Integrating ultra-high saturation magnetization intensity and extreme-low coercivity in FeCoBSiCu alloy assisted by machine learning [J]. Acta Materialia, 2025, 285: 120 643.
- [29] ROY A, TAUFIQUE M F N, KHAKUREL H, et al. Machine-learning-guided descriptor selection for predicting corrosion resistance in multi-principal element alloys [J]. npj Materials Degradation, 2022, 6: 9.
- [30] WANG Y F, GOH B, NELATURU P, et al. Integrated high-throughput and machine learning methods to accelerate discovery of molten salt corrosion-resistant alloys [J]. Advanced Science, 2022, 9(20): 2 200 370.
- [31] OZDEMIR H C, NAZARAHARI A, YILMAZ B, et al. Machine learning-informed development of high entropy alloys with enhanced corrosion resistance [J]. Electrochimica Acta, 2024, 476: 143 722.
- [32] SASIDHAR K N, SIBONI N H, MIANROODI J R, et al. Enhancing corrosion-resistant alloy design through natural language processing and deep learning [J]. Science Advances, 2023, 9(32): 7 992.
- [33] TANG Y C, XIAO B, CHEN S Z, et al. Predefined attention-focused mechanism using center-environment features: A machine learning study of alloying effects on the stability of Nb₅Si₃ alloys [J]. Digital Discovery, 2025, 4: 1 870-1 883.
- [34] 李杨, 邸钰婷, 张志坤, 等. 基于机器学习的高温合金熔铸造涡轮叶片工艺参数优化[J]. 特种铸造及有色合金, 2025, 45(8): 1 160-1 164.
- [35] RAO Z Y, TUNG P Y, XIE R W, et al. Machine learning-enabled high-entropy alloy discovery [J]. Science, 2022, 378(6 615): 78-85.
- [36] 刘轶, 乔乐琳, 李学文, 等. 高通量电弧熔炼制备的 Mo-Re 合金的组织 and 性能研究 [J]. 特种铸造及有色合金, 2025, 45(8): 1 127-1 135.
- [37] KOSTIUCHENKO T, KÖRMANN F, NEUGEBAUER J, et al. Impact of lattice relaxations on phase transitions in a high-entropy alloy studied by machine-learning potentials [J]. npj Computational Materials, 2019, 5: 55.
- [38] LIU Y, WANG J, XIAO B, et al. Accelerated development of hard high-entropy alloys with data-driven high-throughput experiments [J]. Journal of Materials Informatics, 2022, 2(1): 3.

(编辑: 彭瑾)

《特种铸造及有色合金》征稿启事

《特种铸造及有色合金》杂志是中国科学技术协会主管、中国机械工程学会铸造分会和武汉机械工艺研究所共同主办的全国性科技期刊, 是对国内外公开发行的中文核心期刊, 中国科技论文统计与分析用刊, INSPEC、CA、MA、AJ、JST、Scopus 等国内外权威数据库及检索系统收录期刊, 并获得全国优秀科技期刊一等奖、国家期刊奖、新中国 60 年有影响力的期刊、湖北省十大有影响力的自然科学期刊等。

本刊面向国内外广大科技工作者征稿, 征稿内容包括: 各种(黑色和有色合金)特种铸造方法、各种有色合金及复合材料的成形理论、工艺、设备、材料、测试与控制、计算机应用等方面的科技成果、生产技术和现场经验, 此外还包括各相关学科和交叉学科, 如挤压铸造(液态模锻)、半固态加工、新能源材料、电子封装、高熵合金、非晶合金(金属玻璃)、焊接、粉末冶金、合金化、热处理、表面处理等方面的学术和技术研究成果等。

特种铸造及有色合金杂志社(武汉)有限公司

地址: 武汉市江岸区建设大道融玺 1001 大厦 11 楼

邮编: 430019

电话: 027-85358206, 85486024,

85358127

投稿网址: www.special-cast.com

邮箱: tzzz@special-cast.com

