引用格式：宋子毓，崔秀芳，鲁凯举，等. 机器学习赋能增材制造难熔高熵合金设计[J]. 材料工程，2026，54(5)：22-42.
SONG Ziyu，CUI Xiufang，LU Kaiju，et al. Machine learning-enabled design of refractory high-entropy alloys *via* additive manufacturing[J]. Journal of Materials Engineering，2026，54(5)：22-42.

机器学习赋能增材制造难熔高熵合金设计

宋子毓[1,2]，崔秀芳[1*]，鲁凯举[2*]，胡振峰[2]，金　国[1]，梁秀兵[2*]，李小平[3]
（1 哈尔滨工程大学 材料科学与化学工程学院，哈尔滨 150001；2 军事科学院 国防科技创新研究院，北京 100071；3 宁夏东方智造科技有限公司，宁夏 石嘴山 753000）

摘要：难熔高熵合金凭借其卓越的高温性能，在航空航天等极端环境应用中展现出巨大潜力。然而，多元体系的复杂性使传统设计方法面临效率瓶颈，而新兴的增材制造技术虽然突破了传统成形限制，但其特有的非平衡凝固行为和复杂的工艺参数空间又带来了新的调控挑战。基于此，机器学习技术通过数据驱动的研究范式，为揭示成分-结构-性能之间的复杂关联提供了全新解决方案。本文系统综述了机器学习在难熔高熵合金研究中的最新进展，特别聚焦于增材制造工艺场景下的关键问题：一方面探讨了机器学习在相结构预测、强度与塑性优化、硬度设计等方面的应用成效；另一方面深入分析了机器学习在增材制造工艺参数优化、成形缺陷控制、微观组织调控等具体环节的实施策略。尽管当前研究已取得显著进展，该领域仍面临增材制造专用数据匮乏、工艺-性能关联模型泛化能力不足、物理机制嵌入不充分等挑战。因此，建立增材制造导向的标准数据库、发展融合物理约束的机器学习模型并构建工艺-组织-性能一体化优化框架，是推动难熔高熵合金在增材制造领域实现从“可制备”向“可设计”跨越的关键方向。

关键词：难熔高熵合金；机器学习；增材制造；性能预测；多目标优化
doi：10.11868/j.issn.1001-4381.2025.000639　**CSTR**：32421.14.j.issn.1001-4381.2025.000639
中图分类号：TG132.3；TB31　**文献标识码**：A　**文章编号**：1001-4381(2026)05-0022-21

Machine learning-enabled design of refractory high-entropy alloys *via* additive manufacturing

SONG Ziyu[1,2]，CUI Xiufang[1*]，LU Kaiju[2*]，HU Zhenfeng[2]，JIN Guo[1]，LIANG Xiubing[2*]，LI Xiaoping[3]
（1 College of Materials Science and Chemical Engineering，Harbin Engineering University，Harbin 150001，China；
2 National Innovation Institute of Defense Technology，Academy of Military Science，Beijing 100071，China；
3 Ningxia Orient Intelligent Manufacturing Technology Co.，Ltd.，Shizuishan 753000，Ningxia，China）

Abstract：Refractory high-entropy alloys (RHEAs), owing to their exceptional high-temperature properties, show great potential for use in extreme environments such as aerospace systems. However, the inherent complexity of their multicomponent systems poses significant challenges to the efficiency of conventional alloy design methods. Although additive manufacturing (AM) overcomes some limitations of traditional fabrication routes, its intrinsic non-equilibrium solidification behavior and complex process-parameter space introduce new challenges in microstructural control and property optimization. In this context, machine learning (ML) offers a data-driven paradigm for uncovering the intricate composition-structure-property relationships in RHEAs and provides a powerful tool for intelligent materials design. This review systematically summarizes the latest advances in the application of ML to RHEAs, with particular focus on key issues in AM scenarios. On the one hand, the roles of ML in phase prediction, strength and ductility optimization, and hardness design are discussed. On the other hand, ML-enabled strategies for process-parameter optimization, defect mitigation, and microstructural tailoring in AM are thoroughly analyzed. Despite notable progress, several challenges remain, including the scarcity of AM-specific datasets, the limited generalization capability of process-property models, and the insufficient

integration of physical mechanisms. Therefore, establishing standardized databases oriented toward additive manufacturing, developing machine learning models integrated with physical constraints, and constructing an integrated process-microstructure-property optimization framework are key directions for promoting the transition of refractory high-entropy alloys in the field of additive manufacturing from "printable" to "designable".

Key words: refractory high-entropy alloy; machine learning; additive manufacturing; performance prediction; multi-objective optimization

21世纪初，材料科学领域涌现出一种突破性的合金设计策略：通过采用等原子或近等原子比的多主元组合，利用高构型熵效应来稳定单一的固溶体相[1]。基于此，Yeh等[1]率先提出了高熵合金（high-entropy alloys，HEAs）这一材料类别。相较于以单一主元为基础的传统合金，该方法极大地拓展了成分设计空间，为开发兼具优异强度、延性、耐腐蚀性及高温稳定性的新型金属材料开辟了全新途径[2]。

如图1所示，HEAs的卓越性能主要源于其四大核心效应的协同作用：（1）高熵效应：较高的混合熵能有效降低系统吉布斯自由能，从而稳定固溶体相，并抑制金属间化合物的形成，这使其在高温下表现出优异的相稳定性[3]；（2）晶格畸变效应：不同组元原子在尺寸与化学性质上的差异，导致严重的晶格畸变。该效应产生了强烈的应力场，显著阻碍位错运动，从而强化合金并影响其热/力学性能[4]；（3）缓慢扩散效应：组元间巨大的原子尺寸差和化学势差，显著增加了原子迁移的能垒，导致扩散速率呈数量级下降。这不仅延缓了高温下的组织粗化与相变动力学，也提升了其抗辐照性能[5]；（4）鸡尾酒效应：各组元之间的非线性相互作用，使材料的宏观性能（如强度、耐腐蚀性）往往优于其组成元素的性能线性叠加，体现出显著的协同增强作用[6]。

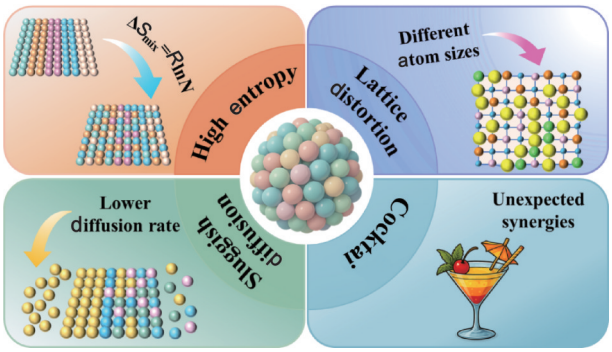


图1　高熵合金的四种核心效应

Fig.1　Four core effects of high-entropy alloys

在此背景下，以W、Mo、Ta、Nb、Hf等高熔点金属为核心组元的难熔高熵合金（refractory high-entropy alloys，RHEAs）应运而生。2010年Senkov等[7]率先报道了具有单一体心立方结构的WNbMoTa及WNbMoTaV等RHEAs体系。凭借其超高熔点、卓越的高温强度及良好的抗氧化性，RHEAs被广泛视为极具潜力的新一代高温结构材料[8]。然而RHEAs发展仍面临严峻挑战：其一，典型配方中高密度元素的广泛使用导致材料整体密度过大，难以满足航空航天等领域对轻量化的迫切需求[9]；其二，材料本身存在显著的室温脆性，加之多元组分固有的化学不均匀性，使其在传统熔炼与加工过程中极易出现成分偏析、组织粗化及开裂倾向等一系列缺陷，严重制约其工程化应用进程。

近年来，增材制造（additive manufacturing，AM）技术的兴起为RHEAs的制备与应用开辟了新路径。与传统熔铸工艺不同，AM技术基于逐层沉积与快速凝固原理，不仅能有效解决高熔点金属的加工难题，更能显著抑制元素偏析、细化微观组织并提升材料致密度。这些特性使其特别适用于复杂构件的近净成形。目前，已展现出良好应用潜力的AM技术主要包括激光金属沉积（laser metal deposition，LMD）、选区激光熔化（selective laser melting，SLM）及电子束熔化（electron beam melting，EBM）等[10]。尤为重要的是，AM工艺参数（如能量输入、扫描策略等）具备高度可调性，通过对这些参数与粉末特性的协同优化，可实现微观组织的精确调控，甚至完成原位合金化与梯度功能构件的一体化制造，从而极大加速RHEAs的研发与优化进程[11]。

尽管AM技术为RHEAs的开发展现出巨大潜力，但目前的研究仍主要依赖于效率低下且资源密集的经验性"试错法"。面对广阔的成分与工艺参数空间，该方法已显得力不从心。为此，研究者们正积极采用计算辅助的设计方法，如第一性原理计算、分子动力学模拟以及CALPHAD热力学建模等[12]。然而，这些方法在应用于多元复杂体系时，常面临计算成本高昂、预测精度有限及适用范围狭窄等问题，尤其在实现工艺与性能的协同设计方面更为突出。

近年来，人工智能（artificial intelligence，AI）的快速发展为材料设计注入了新动能，其中机器学习（ma-

chine learning，ML）方法作为其核心分支，扮演着日益重要的角色。与传统依赖物理模型和经验公式的手段不同，ML通过从实验与计算数据中学习，能够识别高维特征中的隐藏规律，不仅实现了对材料性能的准确预测，更为RHEAs的快速筛选与工艺优化开辟了新途径[13]。如表1[14-16]所示，与传统方法相比，ML在计算效率、可扩展性及高维数据处理能力方面均展现出显著优势。

表1 机器学习与传统研究方法的比较[14-16]

Table 1 Comparison of ML and traditional research methods[14−16]

Method	Advantage	Disadvantage
ML	Rapid predictions for large compositional spaces	Needs high-quality datasets (often scarce in HEAs)
	Reveals hidden composition-property patterns	Limited interpretability ("black box" issue)
	Enables fast screening and property optimization	Weak extrapolation beyond training data
Computational simulation	Reveals atomic-level interactions	High cost and time for multi-component systems
	Explains phase stability, thermodynamics, and mechanical properties	Simplifications/assumptions reduce accuracy
		Limited by system size and timescale
Trial-and-error experiment	Offers reliable real-world HEA data	Time-consuming and costly for wide compositions
	Captures complex phenomena (*e.g.*, defects, phase transformations)	Low throughput, limits parameter exploration
		Some experiments impractical

随着研究不断深入，人们认识到高熵体系的结构与性能远超传统固溶体模型，这种体系中广泛存在的强晶格畸变、局部化学有序、短程原子重排等往往成为决定其稳定性和力学性能的关键因素。He等[17]的研究表明，尽管$Co_{25}Ni_{25}(HfTiZr)_{50}$合金具有约11%的巨大尺寸错配，但其原子尺度B2亚晶格有序与高达约9%的局域畸变协同稳定了结构，并赋予材料独特的超弹性与温度不敏感弹性模量特征。Wang等[18]进一步指出，在高熵B2金属间化合物$(CoNi)_{50}(TiZrHf)_{50}$中，严重晶格畸变不仅导致多滑移系同时激活，还使位错滑移诱发局域结构无序化，从而形成与传统HEAs不同的强-塑协同机制。这些研究共同揭示，多主元体系的性能不再由单一物理规律主导，而是由成分-结构-位错机制的高度耦合共同决定。同样的，RHEAs因其更大的尺寸差异、更高的结合能以及更复杂的相稳定性问题，使其结构预测、成分筛选与性能调控难度加大，并且AM RHEAs过程中还会经历极高热梯度、快速凝固等，这些都会进一步放大局域结构不稳定性、偏析行为和组织演化等不确定性，使基于传统经验的设计策略难以满足需求。

因此，ML有望成为突破RHEAs设计瓶颈的关键技术，目前已有研究表明ML为RHEAs的智能化设计提供了一种全新的数据驱动范式，已成功应用于相组成判定、微观组织调控、热力学与力学性能预测等多个方面[19]。但是，该领域仍面临数据样本有限、模型可解释性不足及外推能力较弱等挑战。值得关注的是，高通量计算、数据增强及可解释AI等前沿技术的持续发展，正为ML在复杂合金体系中的深入应用奠定坚实基础。

当前已发表的综述文献，大多分别概述了增材制造RHEAs的研究进展，或仅简要总结了ML在合金设计中的应用，而将二者系统结合并专注于RHEAs设计的交叉性综述鲜有报道。本文旨在梳理该领域的研究现状，重点分析ML与AM在RHEAs设计中的交叉融合路径，以弥补现有研究的不足，并为未来RHEAs的定向设计与工程应用提供创新的理论支持与技术方案。

1 增材制造的难熔高熵合金

1.1 难熔高熵合金概述

难熔高熵合金（RHEAs）作为一种新兴的高温结构材料，近年来备受关注。这类合金通常以W、Mo、Ta、Nb、Hf等高熔点过渡金属为主要组元，通过近等原子比设计，展现出超高熔点、优异的高温强度及出色的热稳定性，在航空航天、核能装备等极端环境中应用潜力巨大[20]。与传统镍基高温合金相比，RHEAs在超过1200 ℃时仍能保持卓越的力学性能，尤其在屈服强度与抗蠕变能力方面表现突出，因此被视为下一代高温结构材料的有力候选，其性能优势主要源于多主元合金化理念及由此形成的高熵效应与复杂相结构[21-22]。

研究初期，等摩尔比成分被广泛用作基准体系，随后逐步发展出元素替换与浓度微调等策略。例如，在TiZrHfNbTa系合金中引入W元素，可使其屈服强度提高至1700 MPa以上，但塑性会显著下降[23]；而在

MoNbTaW 体系中添加 Ti 元素能改善韧性，引入 Hf 则可能导致强度降低[24]。这类试错研究虽积累了丰富数据，但效率有限。近年来，研究者尝试引入 Al 等轻质元素以改善室温塑性，或掺杂 B、C、N 等小尺寸非金属元素以提升硬度和耐磨性。

在相稳定性研究中，混合焓（ΔH_{mix}）、混合熵（ΔS_{mix}）、原子尺寸差（δ）及价电子浓度（valence electron concentration，VEC）等热力学参数被广泛应用。通常，当 $\Delta S_{mix} \geqslant 1.61R$（约 6.6 J·mol^{-1}·K^{-1}）且 ΔH_{mix} 接近零时，更易形成稳定固溶体；而 δ 较大或 ΔH_{mix} 显著偏离零值则倾向于生成金属间化合物或非晶相。

RHEAs 以其卓越的高温力学性能、抗氧化性、耐腐蚀性及抗辐照能力，在极端服役环境中展现出显著优势。其中，高温强度尤为突出。Senkov 等[25]研究表明，NbMoTaW 与 NbMoTaWV 合金在 1600 ℃下仍能保持 400～500 MPa 的屈服强度，远优于传统 Inconel 718 和 Mar-M247 合金。$Nb_{45}Ta_{25}Ti_{15}Hf_{15}$ 合金因扭折带（kink band）机制作用，展现出优良的断裂韧性，适用于极端冲击工况[23]。此外，高熵陶瓷的兴起进一步拓展了 RHEAs 的应用边界，例如 NbMoTaWHfN_x 氮化物在 1800 ℃下仍具备高强高硬特性，适用于热端部件。

尽管性能卓越，RHEAs 的实际应用仍面临室温脆性、密度偏高及高温氧化膜稳定性不足等挑战。当前，由于缺乏系统化的设计准则，相关研发仍以试错法为主导。未来研究应注重结合计算模拟、热力学建模与数据驱动技术，深入揭示成分-结构-性能间的内在关联，以实现强度与塑性的协同提升。同时，抗氧化性能的定量调控也日益受到重视，这对于其在极端环境下的可靠应用至关重要。在航空航天与核能工程等领域需求的推动下，RHEAs 的工程化进程正迎来重要的发展机遇。

1.2　增材制造难熔高熵合金概述

近年来，RHEAs 在高温结构材料领域展现出巨大潜力，但其室温脆性大、成形性能差以及传统制备方法的局限性，已成为制约其发展的关键瓶颈[9,12]。传统熔炼、铸造与粉末冶金等常规手段在应对这类高熔点、低塑性的合金体系时，往往难以实现复杂构件的精确制造与高效成形。而 AM 技术以其独特的逐层堆积与快速凝固特性，为突破这些技术瓶颈提供了全新的解决方案[26]。

基于离散-堆积原理的 AM 技术，不仅有效克服了难熔合金高熔点带来的工艺限制，还实现了复杂结构的一次成形与近净成形，显著缩短了研发周期，降低了生产成本。特别值得关注的是，该技术还展现出传统方法难以企及的原位合金化与梯度功能化等独特优势[27-28]。这种技术特性与 RHEAs 的需求高度契合，使得 AM 与 RHEAs 的结合应用正逐渐成为该领域的重要发展方向。

目前，应用于 RHEAs 制备的 AM 技术主要涵盖激光金属沉积（LMD）、选区激光熔化（SLM/LPBF）与电子束选区熔化（EBM）三大类[29]。其中，LMD 技术采用高能激光与同轴送粉相结合的工作方式，具有原料适应性强的显著特点。该技术可直接使用混合元素粉末实现高通量原位合金化，有效规避了高质量球形预合金粉末制备困难的瓶颈问题[28]。Dobbelstein 团队[30-31]通过系统的工艺探索，已成功利用 LMD 技术制备出 MoNbTaW 与 TaNbHfTiZr 等典型 RHEAs 材料。研究表明，通过优化工艺参数并采用多次重熔策略，能够显著减少未熔高熔点颗粒的存在，有效提升成形件的成分均匀性与组织致密性。

SLM 作为粉末床熔融技术的代表，通过激光束对预先铺设的粉末层进行选择性扫描，实现三维构件的逐层成形。该技术最显著的特征是其极高的冷却速率（10^3～10^6 K/s），这种快速凝固条件有助于细化显微组织，促进细小胞状结构或超细枝晶的形成，从而显著提高合金的显微硬度和压缩强度[27]。例如在 NbMoTaW 合金的研究中，SLM 制备的样品展现出明显细化的晶粒组织，其显微硬度超过 1000HV，室温压缩强度也显著优于传统镍基高温合金[32-33]。然而，SLM 技术在 RHEAs 制备中仍面临诸多挑战，其中粉末制备困难和成分偏差问题尤为突出。不同元素粉末在粒径分布、熔点温度和激光吸收特性方面存在的显著差异，容易导致低熔点元素过度蒸发或高熔点元素未完全熔化，进而引发孔隙、裂纹等成形缺陷[34]。针对这些问题，研究者们通过开发基板预热系统和基于有限元模拟的工艺参数优化方法，在一定程度上实现了热应力的有效控制与翘曲变形的改善[35]。

EBM 技术同样基于粉末床原理，但在高真空环境下以高能电子束作为热源。该技术特有的粉末预热工艺能够显著降低加工过程中的残余热应力，这一特性使其特别适用于高熔点、高脆性 RHEAs 体系的制备[36]。Popov 团队[37-38]在该领域开展了系统性研究，他们采用 EBM 技术成功制备了 $Al_{0.5}CrMoNbTa_{0.5}$ 合金，并对成形过程中的元素蒸发行为进行了深入分析。研究发现，由于铝元素在高真空环境下的饱和蒸气压较高，成形件中出现了明显的铝含量偏差，这一现象揭示了 EBM 技术在易挥发元素控制方面面临的技术挑战。

综合分析现有研究成果可知，AM 技术为 RHEAs

的发展开辟了全新的技术路径。不同的AM工艺在成形效率、组织控制能力与成分灵活性方面各具特色，形成了互补的技术格局。大量研究数据表明，通过AM制备的RHEAs在显微硬度、压缩强度及高温力学性能方面均表现出显著优势，部分样品在1000 ℃高温条件下仍能维持600 MPa以上的强度水平[34]，展现出替代传统镍基高温合金的巨大潜力。然而，该技术在实际应用中仍面临成分精确控制、工艺诱发缺陷抑制以及专用粉末制备等关键技术瓶颈[39]。

2 机器学习合金设计概述

ML作为一种新兴的数据驱动方法，已成为解决RHEAs复杂成分设计与性能优化难题的关键工具[40]。其核心在于通过算法构建材料特征与目标性能之间的复杂映射关系，并利用已知数据集进行训练，从而实现对未知合金成分或工艺下性能的准确、快速预测[13]。与传统依赖物理模型或经验规律的研究方法相比，ML在处理高维、非线性数据方面展现出其独特价值。它能够从海量实验与计算数据中捕捉难以被传统手段发现的隐含规律，在处理大规模数据、解析复杂关联以及加速性能预测方面表现出显著优势，进而极大地缩短了合金的研发周期，显著加速了高性能合金的筛选与优化进程[41]。

在当前的RHEAs研究中，一个典型的ML工作流程主要包含四个核心环节：数据收集与整合、数据预处理与特征工程、ML模型训练以及最终的模型验证与结果解析[42]。如图2所示的链式路径，清晰地对比并凸显了该方法相较于传统“试错法”在设计效率与深度上的双重优越性。这一流程不仅为合金设计提供了一条高通量的新途径，深化了对“成分-工艺-组织-性能”之间内在关联的物理理解，也因其强大的模式识别能力，展现出跨越不同材料体系的良好迁移性与泛化潜力[43]。

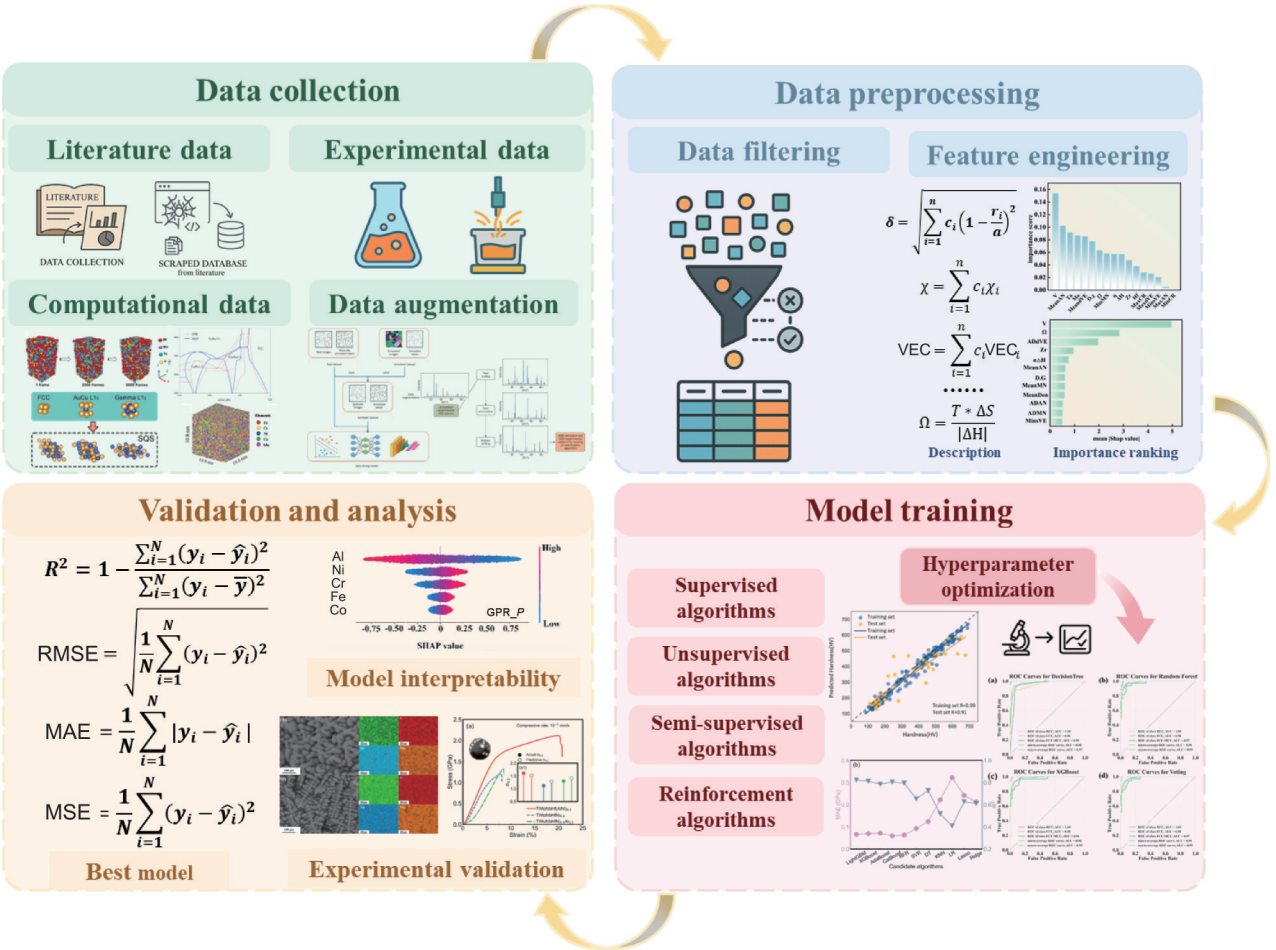


图2 ML工作流程示意图

Fig.2 Schematic diagram of the ML workflow

2.1 数据集构建及数据预处理

数据收集是ML研究的基石，其质量直接决定了模型预测的可靠性与泛化能力。高质量的数据集不仅能有效提升模型的预测精度，也为后续的实验验证

提供了坚实依据[44]。当前，RHEAs 领域的数据主要来源于两大渠道：一是广泛分布于各类文献中的实验测量数据；二是通过第一性原理计算、分子动力学模拟等手段产生的计算数据。这些数据通常涵盖了从基本的元素组成、详细的工艺参数到各项关键性能指标等多个维度[45]。

然而，原始数据通常存在量纲差异大、维度高、样本稀疏及分布不均等问题[46]。若变量量纲不统一，模型在训练过程中可能会不公正地赋予某些特征过高的权重，从而导致预测失真。因此，在构建模型之前，必须对数据进行系统的预处理。常用的方法包括归一化（将数据线性缩放至[0，1]区间）与标准化（将数据转换为均值为0、标准差为1的分布），这两种方法均能有效提升模型的收敛速度与最终的预测精度[47]。

2.2　特征工程

特征工程在 ML 流程中扮演着至关重要的角色，其目标是构建能够精确表征材料物理化学本质的特征描述符。理想的特征描述符应同时具备低维度、低计算成本及高区分度等特性[48]。在 RHEAs 研究中，常用的特征包括价电子浓度、原子尺寸差、混合焓、混合熵、电负性差及平均熔点等[49]。近年来，研究者们也致力于开发更具代表性的新型描述符，例如，Huang 等[50]巧妙结合塑性理论、热力学原理与原子本征属性，提出了加权平均与二元相关性描述符，成功将 BCC 结构难熔高熵合金延展性的预测准确度提升至 0.85以上。然而，特征并非越多越好，冗余或无关的特征会引发“维度灾难”，不仅增加计算复杂度，更易导致模型过拟合与泛化能力下降，因此，特征选择成为此环节的关键步骤[51]。

常用的特征选择策略主要分为三类：

（1）过滤法：该方法独立于后续的 ML 模型，主要依据方差、相关系数等统计指标对特征进行初步筛选。它能有效去除高度相关的冗余变量，降低多重共线性与过拟合风险，计算效率高[52]。

（2）包裹法：该方法将特征选择与模型性能直接挂钩，通过递归特征消除、遗传算法等手段，依据模型在特征子集上的表现进行筛选。虽然计算成本较高，但它能更好地揭示成分与性能之间的潜在复杂规律[53]。

（3）嵌入式方法：该方法将特征选择过程嵌入模型训练中。例如，LASSO 回归通过引入 L1 正则化项自动实现稀疏特征筛选；而岭回归则利用 L2 正则化来提升模型稳定性。此外，随机森林与 XGBoost 等集成学习模型能够直接输出特征重要性评分，因而在实际应用中备受青睐。

与此同时，模型的可解释性也日益受到关注。例如，SHAP 分析能够量化每个特征对单个预测结果的贡献度，提供局部与全局双重视角的解释。这不仅验证了模型决策的合理性，更有助于揭示 RHEAs 中潜在的物理规律，从而为后续的实验设计和新成分探索提供宝贵的理论依据[54]。

2.3　建模与预测方法

在完成高质量的数据集构建与精心的特征工程后，算法的选择便成为构建高性能预测模型的核心环节。ML 方法主要可分为监督学习、无监督学习与强化学习三大类[13]。

监督学习是目前在 RHEAs 研究中应用最为广泛的方法。它依赖于带有明确标签（如相结构、强度、硬度）的数据集，核心任务是学习从输入特征到目标性能的复杂映射关系，在相态判别与性能预测研究中发挥着主导作用[55]。

无监督学习适用于处理无标签数据，侧重于发现数据内在的结构与模式。例如，主成分分析可用于高维数据的降维与可视化；而生成对抗网络则能通过数据增强来扩充有限的数据集，这些方法都有助于提升建模效率与模型的泛化能力[56-57]。

强化学习通过智能体与环境的持续交互来优化决策策略，其在材料合成路径优化等领域已展现出潜力，但在 RHEAs 成分与工艺设计中的应用仍处于初步探索阶段[58-59]。

总体而言，在当前的研究格局中，监督学习是主流方法，无监督学习多作为有效的辅助手段，而强化学习则代表了未来的重要发展方向[50]。以下将重点介绍在 RHEAs 研究中几种常用的监督学习方法，其典型原理与流程如图 3 所示。

支持向量机（support vector machine，SVM）是一种常用的监督学习算法，擅长处理高维和非线性问题。其核心思想是通过最大化分类间隔来寻找最优超平面，实现分类或回归。借助核函数，SVM 能将线性不可分的数据映射到高维空间，从而处理复杂的非线性关系[60]。模型训练过程中只有少量支持向量决定超平面的位置；预测时，模型则根据新样本与这些支持向量的关系进行分类或回归。

人工神经网络（artificial neural network，ANN）是一种模仿生物神经元结构的 ML 模型，具有强大的自适应学习和非线性拟合能力。模型由输入层、隐藏层和输出层组成，数据通过带权重的连接和非线性激活函数逐层传递并输出结果。ANN 能有效拟合复杂非线性关系，在大数据场景下表现优异，并具备一定的抗噪能力。但在小样本条件下容易过拟合，对学习

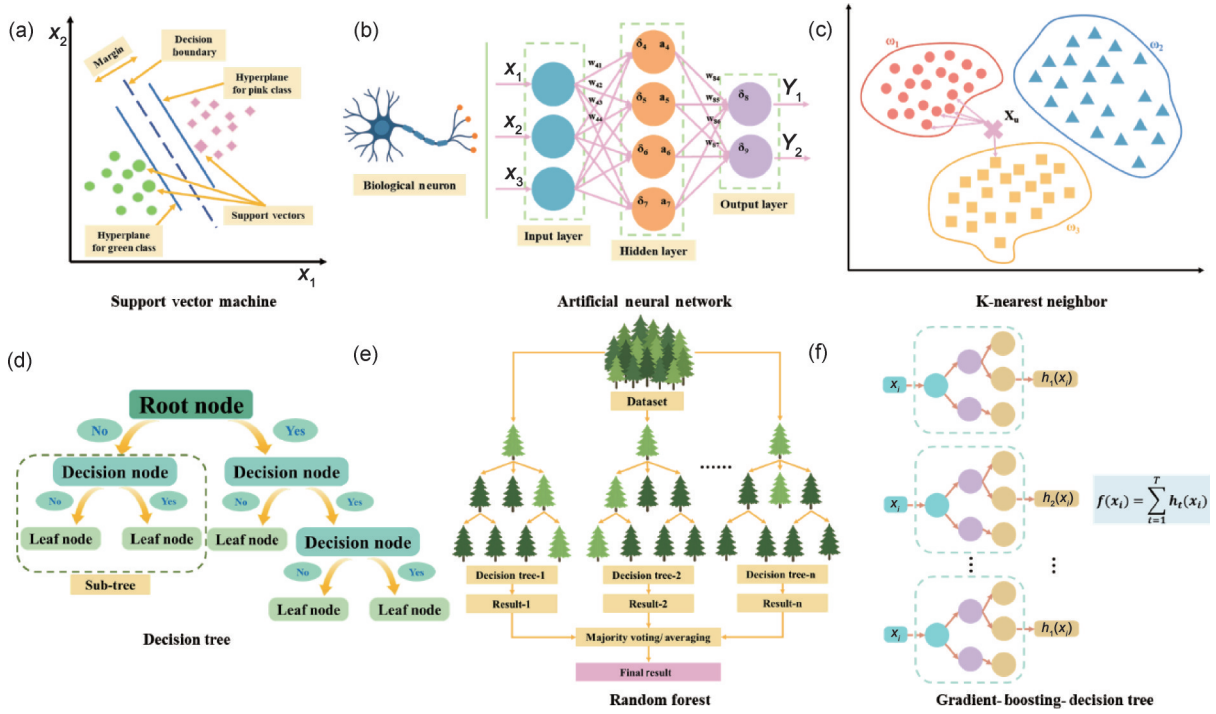


图 3 几种代表性监督学习算法原理图 (a)支持向量机;(b)人工神经网络;(c)K 近邻;(d)决策树;(e)随机森林;(f)梯度提升树

Fig.3 Schematic diagrams of several representative supervised learning algorithms (a)support vector machine; (b)artificial neural network; (c)K-nearest neighbor; (d)decision tree; (e)random forest; (f)gradient-boosting-decision tree

率、网络深度等超参数较为敏感,且内部机制不透明,常被视作“黑箱”模型[61]。

K 近邻(K-nearest neighbor,KNN)是一种惰性学习算法,其不需要显式训练,而是直接存储所有训练样本。预测时,通过计算待测样本与所有样本的距离,选出其 K 个最近邻,并用多数投票(用于分类)或平均值(用于回归)得到结果[62]。KNN 原理简单、实现方便,对噪声也较为鲁棒;但其预测时的计算成本会随数据量增大而迅速增加,且在高维情况下容易受到“维度灾难”影响导致性能下降。

决策树(decision tree,DT)是一种基于树形结构的监督学习模型,通过逐层选择最优特征和分裂点,将数据递归划分并形成决策路径[63]。其优势在于结构直观、易于解释、计算效率高。但单棵决策树容易过拟合,尤其在树过深时,对噪声也较为敏感,导致泛化能力有限。

随机森林(random forest,RF)是一种基于 Bagging 的集成学习方法,通过对原始数据自助采样构建多个训练子集,并为每个子集训练一棵决策树;同时,在节点分裂时随机选取部分特征,提高模型的多样性。最终,模型通过多数投票或平均得到预测结果[64]。相比单棵决策树,RF 具有更高的精度和泛化能力,能处理高维数据并提供特征重要性评估。但其训练计算量较大,仍可能受噪声影响。

XGBoost(Xtreme gradient boosting)是一种高效的梯度提升树方法,通过逐步训练多棵弱学习器来拟合残差,并在目标函数中加入正则化以控制模型复杂度、减少过拟合[65]。它还结合了列抽样、并行处理和稀疏优化等技术,使其具有高计算效率和强预测性能,尤其适用于大规模数据。但其超参数较多、模型可解释性仍有局限。

LightGBM (Light gradient boosting machine) 是 GBDT 框架下的一种高效实现,采用带深度限制的叶子生长策略,并结合梯度单边采样和互斥特征捆绑,以减少数据量和特征数,从而在保持精度的同时大幅提升训练速度和降低内存占用[65]。它支持并行与 GPU 加速,适合大规模数据;但在小样本或低维场景下若参数不当,则容易出现过拟合,需要谨慎调参。

2.4 训练与评估

对 ML 模型进行系统且量化的评估,是优化其性能并确保其实际应用价值的关键环节。评估过程不仅需关注模型在训练集上的拟合效果,更应着重考察其在未知独立测试集上的泛化能力,后者对材料设计与性能预测具有更重要的现实意义。在评估方法上,K 折交叉验证是当前广泛采用的稳健策略。该方法将原始数据集随机划分为 K 个互斥的子集,随后依次将每个子集作为测试集,其余 K−1 个子集合并作为训练集,进行 K 次训练与验证,最终综合 K 次评估结果的

平均值作为模型性能的最终估计。这种重复采样的策略能够有效降低因单次数据划分偶然性而导致的评估偏差，同时缓解模型的过拟合与欠拟合风险。相比之下，简单的训练集-测试集随机划分法虽然在操作上更为简便，但其评估结果对数据的具体划分方式极为敏感。不同的随机种子可能导致性能评估值出现显著波动，因此评估结果的稳定性和可靠性通常低于K折交叉验证。

需要注意的是，单一评价指标往往只能反映模型性能的某一方面，具有局限性。在实际应用中，应根据具体任务需求选取适当的评价指标体系，或采用多指标综合评估策略，从而全面客观地衡量模型性能。

2.5　模型可解释性

尽管ML模型显著提升了材料设计的效率，但其“黑箱”特性也引发了对预测结果可靠性的普遍关切。特别是在RHEAs这类复杂体系中，成分-结构-性能之间的内在关联极为复杂，仅凭模型的预测结果难以深入理解其背后的物理机制。因此，模型可解释性研究正日益成为该领域的重要研究方向。

目前，已有多种方法被广泛应用于增强ML模型的可解释性。特征重要性评估作为最基础的手段，能够量化各输入特征对预测结果的相对贡献程度；SHAP分析基于合作博弈论中的Shapley值理论，将模型预测值公平地分解为各个特征的边际贡献，既能从全局视角分析特征的整体影响力，也能针对单个预测样本提供局部解释，同时还能揭示特征间的交互效应；部分依赖图通过可视化方式直观展示某一特征与预测目标之间的依赖关系；而LIME方法则通过构建局部替代模型，对特定样本的预测行为进行解释。

这些可解释性方法显著提升了ML在RHEAs设计中的透明度与研究深度，不仅帮助识别出影响性能的关键物理描述符，更有助于深入理解成分与性能之间的复杂映射关系。在此基础上，研究者能够建立更具物理意义的特征工程方案，甚至发现新的材料设计规律。然而，现有可解释性方法在处理高维非线性数据时仍存在一定局限性，且不同方法对同一模型的解释结论有时可能存在差异。因此，如何在保持预测精度的同时，平衡模型的解释能力与计算效率，并建立与材料物理学本质更契合的解释框架，仍是未来研究中需要持续探索的重要方向。

3　机器学习在难熔高熵合金设计中的研究进展

相较于传统依赖经验判据与高成本热力学模拟的设计策略，ML通过高效学习合金成分与性能间的复杂非线性关系，实现了对关键性能的精准预测与成分空间的快速筛选，从而在提升研发效率与设计精度方面展现出优势。

目前，ML在RHEAs设计中的应用已形成五个核心方向：相结构预测、室温强度优化、高温强度设计、塑性调控及硬度提升。相关研究不仅显著提高了性能预测的准确性与计算效率，更在揭示材料强化与塑性变形机制、建立可解释的设计准则方面取得重要进展。具体而言，分类模型与热力学计算的结合加速了相结构识别与稳定性评估；回归模型与多目标优化算法的融合，有力推动了强度与塑性的协同提升；而可解释性方法与物理约束的引入，则进一步增强了模型的泛化能力与物理合理性。

为系统梳理近年来该领域的研究进展，表2[47,66-81]汇总了ML在RHEAs设计中的代表性成果，后续将据此展开详细论述。

3.1　相结构

在RHEAs体系中，相结构是决定其综合性能的核心因素，直接影响材料的力学响应、热稳定性及服役可靠性[21]。传统的相结构设计主要依赖经验判据和热力学模拟方法，然而在多主元复杂体系中，这些方法常因计算成本高昂、预测精度有限而难以满足高效设计的需求[82]。

为提升相预测效率，Naveen等[66]开发了一种多阶段集成学习框架，专门用于识别具有高温稳定性的BCC结构RHEAs。该研究将ML、热力学模拟与实验验证有机结合，研究体系涵盖Mo、Nb、Ti、V、Ta、W和Zr等关键元素。通过随机森林模型实现了相结构的高精度分类，并识别出价电子浓度和电负性差是主导BCC相稳定性的关键描述符。电弧熔炼实验与热力学模拟结果共同证实，MoNbTiVW、MoNbTiTaW和MoNbTiVTaW等合金体系均呈现单一BCC相结构，验证了模型的准确性与泛化能力。

Roy等[47]基于梯度提升算法构建了相结构预测模型，系统研究了MoTaTiWZr等体系在不同熵值状态下的相组成演化规律。研究表明，熔点和电负性差是控制相形成的决定性参数：较高的熔点倾向于促进多相结构的形成，而较低的熔点则有利于单相固溶体的稳定。此外，混合焓和电负性差对弹性模量的显著影响，进一步证实了电负性与热力学参数在相形成机制中的关键作用。

Gao团队[67]针对轻质难熔合金体系开展了深入研究，提出了一种基于ML的多目标数据驱动设计方法，实现了对相结构、硬度和耐腐蚀性能的协同优化。采

表 2 ML 在 RHEAs 设计中的应用

Table 2 Application of ML in RHEAs design

Property focus	Alloy system	Model type	Sample size	Key feature variable	Main finding/prediction accuracy	Ref.
Phase structure	MoTaTiWZr	GBDT		T_m, electronegativity difference, ΔH_{mix}	Identified the role of T_m and δ in phase formation behavior	[47]
	MoNbTiVTaWZr	RF+thermodynamic simulation		VEC, electronegativity difference	Accurate classification of BCC phase; experimental verification for MoNbTiVW, MoNbTiTaW, MoNbTiVTaW	[66]
	AlNbTiVZrCrMo-Hf	SVM (RBF kernel)	92+22	Δr, electronegativity	Classification accuracy of 94.7% for BCC_A2/BCC_B2/mixed structures	[67]
	Multiple systems	XGBoost+RF	5692	VEC, ΔH_{mix}, δ	97% accuracy for single-phase solid solution prediction	[68]
Room-temperature strength	NbTiTaVMoHfZr	RF+DNN+PSO+GMOS	280	VEC, ΔH_{mix}, *etc.*	R^2=0.98 for yield strength prediction; YS 1580-1740 MPa with 23%-27% fracture strain	[69]
	NbTaTiVW	RF+SHAP		ΔH_{mix}, lattice distortion	Experimental YS 1915-1983 MPa; SHAP reveals strengthening mechanisms	[70]
	NbTiVZr	XGBoost+physics-informed model	220	ΔH_{mix}, T_m, atomic size difference	R^2>0.97; 32.2% increase in YS compared to baseline compositions	[71]
	MoNbTiVWZr	MLP surrogate+cGAN+CALPHAD/Scheil	≈8×10^5 synthetic compositions	ΔH_{mix}, elastic parameters, density, cost	Two cGAN-generated alloys synthesized; hardness 447-462HV; flexural strength 704-779 MPa; ML/CALPHAD predictions match experiments	[72]
High-temperature strength	MoNbTaTiW, HfMoNbTaTiZr	RF	238	δ, ΔH_{mix}, thermophysical properties, VEC	95% prediction accuracy; experimental YS of 1007 MPa at 800 ℃ for HfMoNbTaTiZr	[73]
	VTiMoNbZr	SISSO+GA/PSO+UCB+symbolic regression	64+iterative	Enthalpy of fusion (E_f), δ_r, VEC	Closed-loop inverse design; 21 alloys synthesized, 12 outperform literature; specific strength up to 113 MPa·g^{-1}·cm^{-3} at 1000 ℃	[74]
	NbTaZrHfMo	SVM+Pareto+clustering		Strength distribution, uncertainty	High-temperature YS of 940-974 MPa at 1000-1200 ℃	[75]
	NbTiZrTaVMo	Ensemble (SVM, RF, ANN)		VEC, δ, ΔH_{mix}	YS of 818-1034 MPa at 800 ℃, achieving strength-ductility synergy	[76]
Ductility	Multiple systems	Feature selection+classification	128	Electron affinity, cauchy pressure, electronegativity difference	SHAP analysis reveals core ductility factors; SISSO criterion enables rapid classification	[77]
	Single-phase BCC HEAs	GBDT+knowledge descriptors	92	Pugh ratio, VEC, atomic radius, *etc.*	Classification accuracy >85%, R^2=0.85	[78]
	Ti-V-Nb-Mo	XGBoost+D parameter	242	Elastic constants, γ_{sf}, γ_{usf}	Ductility-oriented design; >50% strain with maintained strength	[79]
	Ti, V, Cr systems	CatBoost+SHAP	130	ΔH_{mix}, VEC, T_m, δ	92% classification accuracy; validated with 14 new compositions	[80]
Hardness	AlNbTiVZrCrMo-Hf	MLP	22	ΔH_{mix}, Δr, electronegativity	R^2=0.95, <5% prediction error, ≈50HV increase	[67]
	CrTaTiV	RF+SHAP	224	ΔH_{mix}, elastic modulus, chemical potential, VEC	R^2=0.89, max hardness 1074HV, Mo/Cr/W strengthening identified	[81]

用径向基核函数的支持向量机分类模型在判别BCC_A2、BCC_B2及复相结构时准确率达到94.7%，其中原子半径差和Pauling电负性被证实为最具区分度的特征变量。实验验证表明，所设计的$Al_{20}Nb_{28}Ti_{20}V_4Cr_{20}Mo_8$合金呈现单一BCC_A2相结构，同时具备较高的硬度和良好的耐腐蚀性能。

Peivaste等[68]基于包含5692组样本的大规模数据集，结合XGBoost与随机森林模型，实现了对固溶体、金属间化合物及非晶相的精确分类，其中对单相固溶体的预测准确率高达97%。研究深入揭示了价电子浓度、混合焓和原子尺寸差对相形貌的协同影响规律：较高的价电子浓度配合中等的混合焓有利于FCC结构稳定，而较低的价电子浓度与负的混合焓则倾向于促进BCC或金属间化合物的形成。

总体而言，ML通过数据驱动方法有效识别出价电子浓度、原子尺寸差、熔点和混合焓等关键相稳定性参数，结合热力学模拟实现了高精度的相结构设计。相较于传统方法，ML不仅在提升预测效率与可靠性方面展现出显著优势，也为多主元难熔合金的定向相工程与成分优化提供了全新的研究范式。

3.2　室温强度

屈服强度作为衡量材料抵抗塑性变形能力的关键力学指标，对在极端环境下服役的RHEAs的结构稳定性具有决定性影响[83]。近年来，随着实验数据与计算资源的不断积累，ML方法在屈服强度预测与优化领域展现出显著优势[55]。该方法不仅能够高效解析高维成分空间中复杂的成分-组织-性能映射关系，还可结合先进的多目标优化算法，实现强度与塑性的协同提升[84]。

在多目标优化与高效成分筛选方面，Xu等[69]提出了一种集成ML预测、成分指纹映射与引导式多目标搜索的新型智能框架。研究以NbTiTaVMoHfZr体系为对象，构建了包含280组实验与文献数据的数据集，通过随机森林和深度神经网络模型实现了屈服强度的高精度预测。结合引导式多目标搜索与粒子群优化算法，成功筛选出多个高强度高塑性合金成分。实验验证表明，其中3种优选合金的室温压缩屈服强度介于1580～1740 MPa，同时保持23%～27%的断裂应变，充分体现了数据驱动模型与全局优化算法在合金设计中的有效协同。

He等[70]针对NbTaTiVW体系进一步发展了多目标性能预测策略，构建了可同步预测屈服强度与断裂应变的双模型框架。经系统比较，随机森林被确定为最优预测模型，其在测试集上的R^2达到0.942。实验测得两种优化成分的屈服强度分别达到1915 MPa与1983 MPa，显著高于传统等原子比合金的1689 MPa。通过SHAP可解释性分析发现，混合焓与材料强度呈负相关，而原子尺度晶格畸变程度的增大则有助于增强固溶强化效应。该研究不仅实现了力学性能的多目标协同建模，还从物理机制层面为成分设计提供了理论指导。

除了正向预测外，Raman等[72]展示了逆向设计在室温强度优化中的应用价值。他们基于高通量合成数据构建MLP代理模型，用于快速预测硬度、室温压缩强度、密度与成本等性能，并结合CALPHAD与Scheil模拟确保生成成分在热力学上可实现。在此基础上，利用条件生成对抗网络筛选出两种满足目标的候选合金成分：$Mo_{13}Nb_{47}Ti_3V_{13}W_7Zr_{17}$与$Mo_{20.3}Nb_{27.8}Ti_{6.5}V_{24.1}W_{6.2}Zr_{15.1}$。实验结果表明，两种合金均形成BCC＋Laves多相组织，强度分别为779 MPa与704 MPa，与ML/CALPHAD的预测趋势高度一致。

Gong等[71]创新性地提出了一种融合第一性原理计算、分子动力学模拟与ML的混合建模策略（图4）。以NbTiVZr体系为研究对象，构建了包含220组弹性常数的全成分空间数据库。通过引入混合熵、混合焓、原子尺寸差、熔点及弹性模量等多维特征，XGBoost模型在所有预测目标上的R^2均超过0.97。研究特别引入了考虑电荷转移效应的修正固溶强化理论，并采用D参数表征位错滑移难度，建立了具有明确物理意义的屈服强度预测模型。实验验证表明，筛选出的NbTiVZr合金屈服强度高达1409 MPa，较传统成分提高32.2%，同时保持29.27%的压缩应变，充分证明了该混合建模方法在精度与物理合理性方面的综合优势。

在RHEAs的设计中，ML技术呈现出多元化的应用路径。通过多目标优化算法，研究者能够实现大规模成分空间中高强度候选材料的高效筛选；结合可解释性分析技术，可以深入揭示影响强度的关键物理参量及其作用机制；而引入物理约束的数据驱动方法，则能在保持预测精度的同时增强模型的物理合理性。研究表明，ML已成为该领域不可或缺的研究工具，其价值不仅体现在高效的成分筛选与精准的性能预测层面，更在于对材料强化机理的深入解析。随着基于ML的成分调控方案不断完善与实验验证的持续推进，材料设计正经历从经验驱动到知识驱动的深刻转变，为新一代高性能RHEAs的开发奠定了坚实基础。

3.3　高温强度

衡量RHEAs在极端环境下能否保持稳定性能的关键指标之一，是其高温强度的维持能力。随着温度升高，由扩散机制主导的热软化效应会显著削弱材料

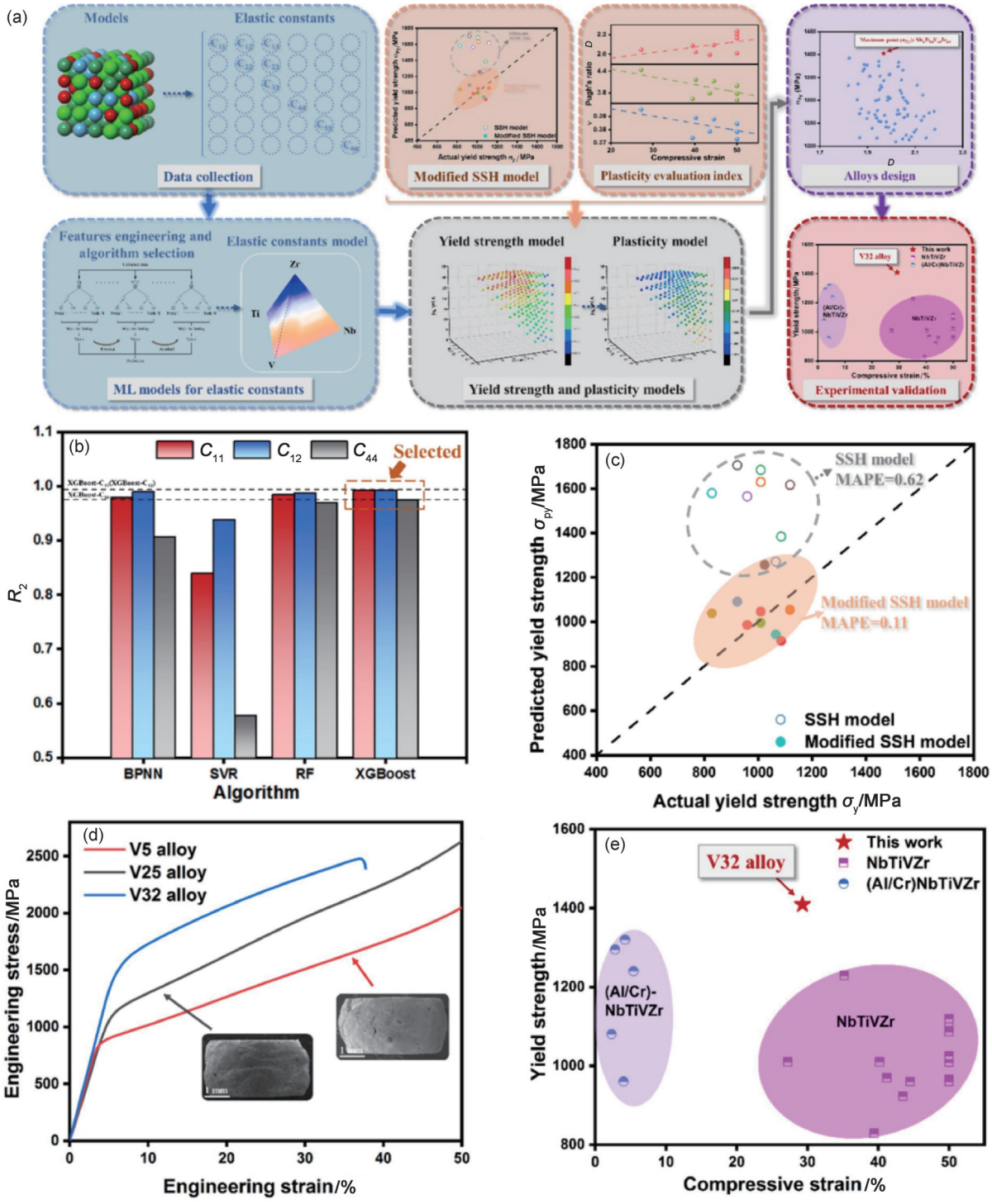


图4 基于ML搜索具有理想室温强度RHEAs的高效合金设计策略应用[71]

(a)合金设计整体策略;(b)4种ML算法对力学性能的预测精度;(c)SSH模型与修正模型的预测屈服强度与实际屈服强度比较;(d)3种合金在室温下的压应力-应变曲线;(e)V32 RHEA与文献报道的其他高性能BCC基RHEAs的屈服强度和压缩应变

Fig.4 Application of efficient alloy design strategies for searching RHEAs with ideal room-temperature strength based on ML[71]

(a)overall strategy for alloy design;(b)prediction accuracy of mechanical properties by four ML algorithms;(c)comparison of predicted yield strength and actual strength of SSH model and modified SSH model;(d)compressive stress-strain curves of three HEAs at room temperature;(e)comparison of yield strength and compressive strain between the V32 RHEA prepared in this work and other high-performance BCC-based RHEAs

的承载能力,这使得高温强度设计成为该领域亟待解决的核心挑战。

Bhandari团队[73]构建了一个包含238个样本数据和25个输入特征的高温强度数据库,并基于随机森林回归模型开展系统研究。该模型涵盖了电负性差、原子尺寸、混合焓、热物理性质及价电子浓度等关键特

征。通过皮尔逊相关性分析与十折交叉验证，模型在训练集上实现了高达95%的预测精度，表现出优异的稳定性。研究进一步将其应用于MoNbTaTiW和HfMoNbTaTiZr合金在不同温度下的屈服强度预测，结果显示：HfMoNbTaTiZr合金在800 ℃压缩实验中的实测强度达到1007 MPa，超过了模型的预测值929 MPa，验证了ML模型在高温条件下的可靠性与泛化能力。

针对小样本数据挑战，Zhao等[74]提出了一种基于符号回归的闭环逆向设计框架，用于加速高温高强RHEAs的发现。该研究以1000 ℃下的屈服强度为目标属性，通过对64组Nb、V、Ti、Mo、Zr等元素组成的初始数据库进行特征筛选，利用SISSO算法获得了仅依赖熔化焓的简洁公式，实现了性能与基础物理描述符的直接映射。与传统复杂模型相比，这种单描述符公式不仅大幅缩小了搜索空间，也显著提高了模型的可解释性。在成分生成环节，符号回归与遗传算法和粒子群优化算法相结合，辅以不确定性加权的UCB准则，有效探索了V-Ti-Mo-Nb-Zr五元体系超过300万个候选成分。通过4轮设计-实验闭环迭代，共合成21种合金，其中12种合金的比屈服强度高于现有文献值，而$V_{14}Mo_{50}Nb_{16}Zr_{20}$与$V_{14}Mo_{43}Nb_{24}Zr_{20}$在1000 ℃下的比屈服强度分别达到112.5、113.2 MPa·g^{-1}·cm^{-3}，较基准值提高约32%。

Wen课题组[75]针对高温强度与塑性的协同优化需求，在NbTaZrHfMo体系研究中构建了集成不确定性评估、帕累托前沿优化与聚类分析的智能设计框架。该研究首先采用支持向量机模型预测强度分布，通过期望改进指标驱动帕累托前沿生成，并利用聚类技术保障候选成分的多样性。在1000～1200 ℃高温压缩测试中，两种优选合金分别表现出974 MPa与940 MPa的屈服强度，显示出优异的抗软化性能与高强度保持能力。这一成果体现了ML结合多目标优化算法在实现高温性能协同设计方面的重要价值。

Catal团队[76]采用多模型集成策略对NbTiZrTaVMo体系进行系统优化研究，融合了支持向量回归、随机森林和人工神经网络3种算法的优势。基于文献数据集训练后，模型筛选出3种优选成分。实验验证表明，这些合金的室温屈服强度分别达到1753、1487 MPa和1662 MPa；在800 ℃高温环境下仍分别保持1034、917 MPa和818 MPa的强度水平。其中，TiNbZrMoV合金表现尤为突出，在维持1600 MPa以上强度的同时实现了20%的伸长率，成功突破了传统RHEAs中“高强-低塑”的矛盾局限，展现出多模型协同优化策略在实现强塑性平衡方面的巨大潜力。

ML在RHEAs高温强度研究中的应用呈现出从单一性能预测向多目标协同优化的明显发展趋势。基于数据驱动的预测模型验证了ML在高温条件下的可靠性；智能成分优化方法揭示了多元素间的协同强化机制；结合不确定性评估与帕累托优化的策略为有限样本条件下的性能平衡设计提供了有效途径；而多模型集成方法进一步拓展了强塑性协同优化的设计空间。这些进展表明，ML不仅作为高效的预测工具，更在揭示强化机理和指导实验设计方面发挥着关键作用，为开发面向实际服役环境的高温强韧型RHEAs奠定了坚实的理论基础。

3.4　塑性

在RHEAs研究领域中，塑性不足是制约其加工成形与工程应用的关键瓶颈。传统的塑性评价方法主要依赖大量实验测试，效率低下且成本高昂，而基于价电子浓度或Rice判据等理论准则在多元复杂合金体系中的适用性也存在明显局限。

针对塑性预测与判别问题，Zhao团队[77]开发了一种融合多策略特征筛选与分类算法的新型预测框架。基于文献数据构建的包含128组断裂应变值的数据库，研究首先将合金划分为高塑性（>25%）与低塑性两类。通过皮尔逊相关性分析、逐步前向选择、遗传算法及特征重要性评估等多种技术，最终筛选出12个关键特征变量，涵盖原子尺寸、电负性、热力学特性与弹性模量等多个物理维度。SHAP分析表明，电子亲和能、Cauchy压力与电负性差是调控塑性的核心因子，其中较高的Cauchy压力值与较低的Pugh模量比有助于提升材料延性。该研究还采用SISSO方法提取低维解析判据，实现了高效率、可解释的塑性分类。

Huang等[78]从知识集成角度出发，将物理描述符嵌入ML模型，以克服传统判据在高维体系中的局限。研究系统收集了92种单相BCC结构高熵合金的室温压缩断裂应变数据，构建了涵盖热力学参量、结构特性与电子特征的196个知识驱动描述符，包括金属键合强度、空位形成能、Pugh模量比、原子半径及价电子浓度等。经过特征工程与超参数优化，筛选出5个关键因子，基于梯度提升算法构建的分类模型准确率超过85%，回归模型精度R^2=0.85。SHAP分析显示，中等价电子浓度与适当的原子尺寸偏差有利于应变硬化能力的提升，而价电子浓度过高或过低均会抑制位错滑移，导致塑性下降。研究还通过符号分类方法推导出准确率达91%～93%的数学表达式，为塑性快速评估提供了有效工具。

Li团队[79]将ML与第一性原理计算、分子动力学模拟相结合，提出了面向Ti-V-Nb-Mo体系的延性导向合金设计策略，如图5所示。研究通过计算获得了

242 组不同成分合金的弹性常数、表面能与广义层错能等参数，并建立 XGBoost 预测模型，实现在全成分空间中显著降低计算成本（R^2>0.85）。通过结合固溶强化理论与 D 参数（γ_s/γ_{usf}），构建了延性与比屈服强度的联合预测框架。结果表明，Mo 与 Nb 含量的增加有助于提高强度，而降低价电子浓度与增大 D 值则可改善塑性。最终制备的 $Ti_{20}V_{35}Nb_{35}Mo_{10}$ 与 $Ti_{35}V_{35}Nb_{10}Mo_{20}$ 两种合金在压缩实验中均表现出 50% 以上的塑性变形能力，同时保持较高强度，验证了 ML 设计准则的有效性。

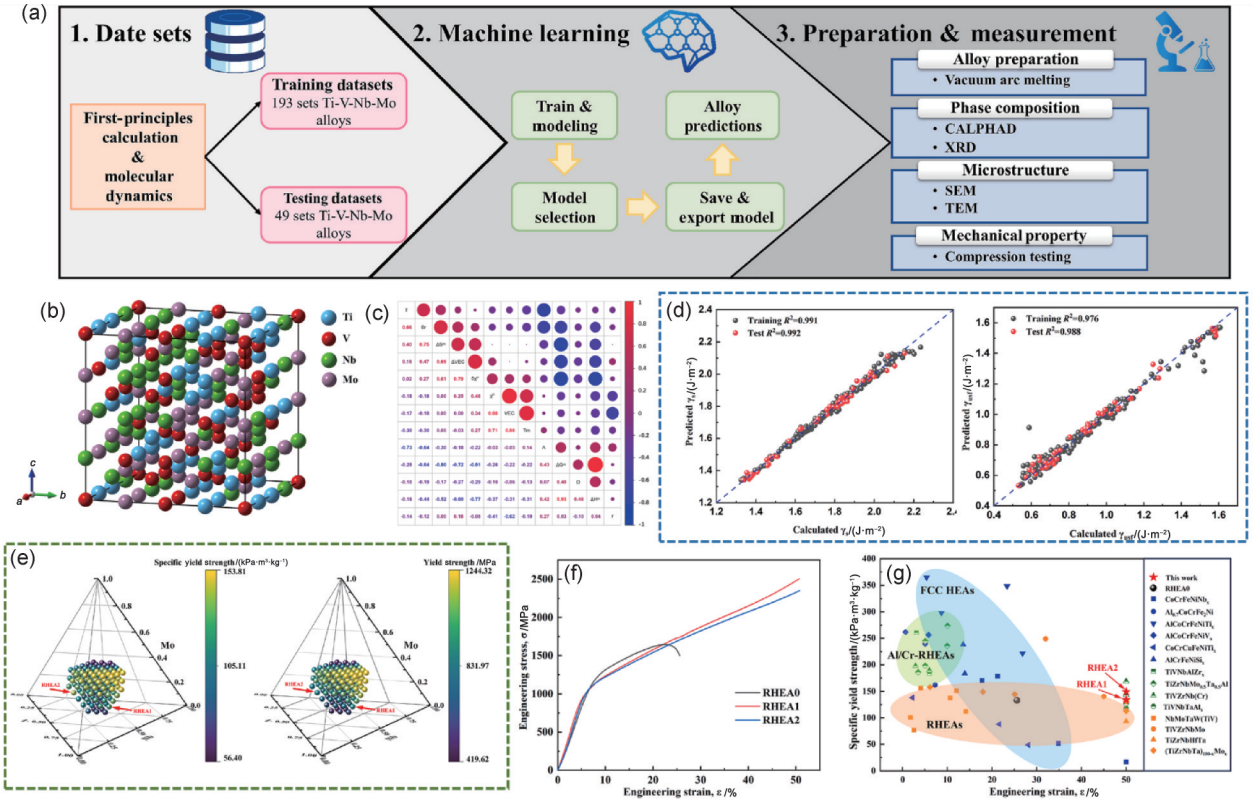


图 5　ML 辅助设计高延展性和比屈服强度 RHEAs 应用[79]

（a）ML 合金设计及实验验证流程；（b）用于计算弹性常数的 SQS 模型；（c）13 个输入特征之间的皮尔逊相关系数；（d）训练集和测试集的 XGBoost 模型预测与 γ_s 和 γ_{usf} 的第一性原理计算值的比较；（e）全组成空间 Ti-V-Nb-Mo RHEAs γ_s 和 γ_{usf} 的 XGBoost 模型预测；（f）3 种 RHEAs 的压应力-应变曲线；（g）ML 设计合金力学性能与已报道合金性能对比

Fig.5　ML-assisted design of high ductility and specific yield strength RHEAs applications[79]

(a) flow chart of ML alloy design and experimental validation; (b) SQS model used to calculate the elastic constants; (c) Pearson correlation coefficient between thirteen input features; (d) comparison of XGBoost model predictions in training and testing sets with first principles calculated values for γ_s and γ_{usf}; (e) XGBoost model predictions of the Ti-V-Nb-Mo RHEAs in the whole compositional space for γ_s and γ_{usf}; (f) compressive stress-strain curves of the three RHEAs; (g) comparison of mechanical properties of alloys designed by ML with those of reported alloys

Zheng 团队[80]构建了融合物理特征与可解释 ML 的分析框架，研究系统考察了涵盖 Ti、V、Cr 等 9 种过渡族金属的 130 组合金体系，采集了完整的压缩塑性及强度实验数据。选取了包括混合焓、混合熵、原子半径差、价电子浓度和熔点等 8 类物理描述符作为输入特征，基于 30% 断裂应变阈值对高塑性合金进行分类。CatBoost 模型表现优异，训练集准确率达 98.18%，测试集为 92.00%。通过 SHAP 分析，研究明确了影响塑性的关键因素：混合焓对塑性具有积极影响，而价电子浓度超过 4.5、熔点高于 2400 K 或原子半径差过大均会导致塑性下降。模型对新设计的 14 种合金成分中的 13 种实现了正确分类，特别是在 $TiZrNbTa_x$ 体系中，压缩实验结果与预测高度吻合，体现了该方法兼具预测可靠性与物理合理性。

当前，ML 在 RHEAs 塑性研究中的应用主要体现在两个方向：一是基于高维物理特征构建可解释的塑性预测与判别模型；二是将 ML 融入延性导向的成分设计流程。这些研究突破了传统实验评估的局限，实现了大规模成分空间的快速筛选，促进了第一性原理计算与连续介质力学模型的协同，为开发满足工程加工与服役要求的难熔高熵合金提供了新的指导方法与技术路径。

3.5　硬度

硬度作为评价材料抗变形与耐磨性能的关键指标，在RHEAs研究中具有重要意义。然而，由于其多元组分与多相组织的复杂性，传统经验判据与实验方法在硬度预测中效率有限，规律提取亦较为困难。ML方法的引入为硬度预测与优化提供了新的技术途径。

Gao团队[67]针对AlNbTiVZrCrMoHf系轻质难熔高熵合金开展了系统性研究。该研究收集了22组BCC_A2单相合金的硬度数据（200～550HV），构建了基于多层感知机的硬度预测模型。研究结果显示，该模型表现出优异的预测能力，训练集与测试集的决定系数R^2分别达到0.95和0.92，平均绝对误差低于13HV。基于这一可靠模型，研究团队进一步通过相结构预测技术评估了95万种虚拟合金成分，成功筛选出3种高硬度候选合金。其中最优成分的硬度达到593.8HV，较文献报道最高值提升约50HV，且预测误差小于5%。研究还发现，随着Al原子分数从8%增至20%，合金硬度从507.4HV上升至593.8HV，这一变化趋势验证了混合焓降低与固溶强化效应之间的正向关联。

Li等[81]针对CrTaTiV四元体系，构建了包含224组显微硬度数据的回归模型框架。结果表明，随机森林模型预测性能最优，在不同输入模式下决定系数R^2最高达0.89，均方根误差为20～24HV。研究从180个初始特征中筛选出5个关键参数：混合焓、弹性模量、局域化学势差、平均原子尺寸与价电子浓度，其中混合焓对硬度影响最为显著。基于模型预测，成功制备出7种高硬度合金。显微硬度测试显示，$Cr_{34}Ta_{21}Ti_{19}V_{23}$-$W_{13}$、$Cr_{38}Ta_{20}Ti_{24}V_{18}$与$Cr_{45}Ta_{21}Ti_{20}V_{14}$ 3种合金的实测硬度分别为856、1046HV与1074HV，较数据库峰值提升6.3%～33.4%。SHAP分析表明，Mo/Cr/W元素含量增加、混合焓降低、局域化学势差增大以及较小的平均原子尺寸均有利于硬度提升，而Ti/Nb含量过高则会削弱硬度。XRD结果显示高硬度样品以BCC结构为主，Laves相含量极低，表明硬度提升主要源于固溶强化而非析出强化。

ML技术的引入显著提升了RHEAs硬度预测的效率与准确性，促进了高性能合金的多目标设计新范式的建立，并深化了对硬度调控机理的理解。当前研究呈现出两条相辅相成的技术路径：其一是基于高通量数据与多目标优化算法，实现高硬度合金的快速筛选与实验验证；其二是通过精细的特征提取与可解释模型构建，揭示关键物理参数对硬度的影响机制，建立可靠的判别准则与预测模型。

4　机器学习在难熔高熵合金增材制造中的研究进展

对于RHEAs而言，其极高的熔点、宽凝固区间与显著的热裂倾向，使其在AM中的可加工性成为长期制约其应用的核心瓶颈。已有研究表明，RHEAs在AM中的成形难度明显高于传统合金及中低熔点HEAs，例如Abdullah等[10]指出，由于高熔点元素熔化困难、粉末润湿性差、凝固区间宽、热裂敏感性强以及严重的元素偏析，RHEAs在激光粉末床熔融过程中极易出现未熔、孔洞与贯穿裂纹等固有缺陷，从而导致AM工艺窗口极为狭窄。Thapliyal等[85]则进一步从原子尺度揭示了RHEAs可制造性差的根本原因，他们所制备的NbTiTaMoHfZrC体系中，轻元素（O、N）在晶界富集削弱晶界黏结力并降低固有延性，使合金在激光定向能量沉积（laser directed energy deposition，L-DED）工艺中难以吸收热循环产生的应变，从而出现大尺度的冷裂纹。

近年来，在数据驱动方法的推动下，ML与AM技术的深度融合正在重塑材料的传统设计方法[86]。然而，当前大多数基于ML的RHEAs成分设计仍主要聚焦于优化性能方面，对于AM而言，ML的作用并非单纯局限于工艺参数问题，而应结合成分、凝固路径、微观组织及热力学行为等多种前置条件。以Acemi等[87]的研究为例，其研究虽未直接开展AM实验，但其提出的多目标、多约束高通量ML框架本质上为“可打印性导向的成分设计”提供了新的路径。该研究将熔点、凝固区间、相稳定性、化学潜势及高温力学性能等与可打印性高度相关的物性参数共同纳入ML模型，并在百万级钨基RHEAs成分空间中进行系统筛选，排除了熔点过高、凝固范围过宽或易形成脆性相的“不可打印”组合，从设计源头降低了AM过程中的热裂纹、偏析和熔池不稳定风险。

与传统金属材料相比，目前直接利用ML指导RHEAs AM的研究仍然极为有限。现有工作多集中于工艺参数优化或相结构预测，尚未形成从成分设计到可制造性的完整ML驱动框架。因此，本节将先回顾ML在传统合金与高熵合金AM中的典型应用，并进一步分析该方法向更复杂的RHEAs体系迁移时所面临的挑战，以探讨ML如何在未来推动RHEAs从“可打印”迈向“可智能设计”的发展路线，图6[88-90]展示了ML在AM合金中的几种典型应用策略。

在传统合金体系中，ML主要用于揭示工艺参数、微观组织与性能之间的耦合关系。以Ti-6Al-4V为例，Montalbano等[91]构建了覆盖激光功率、扫描速度

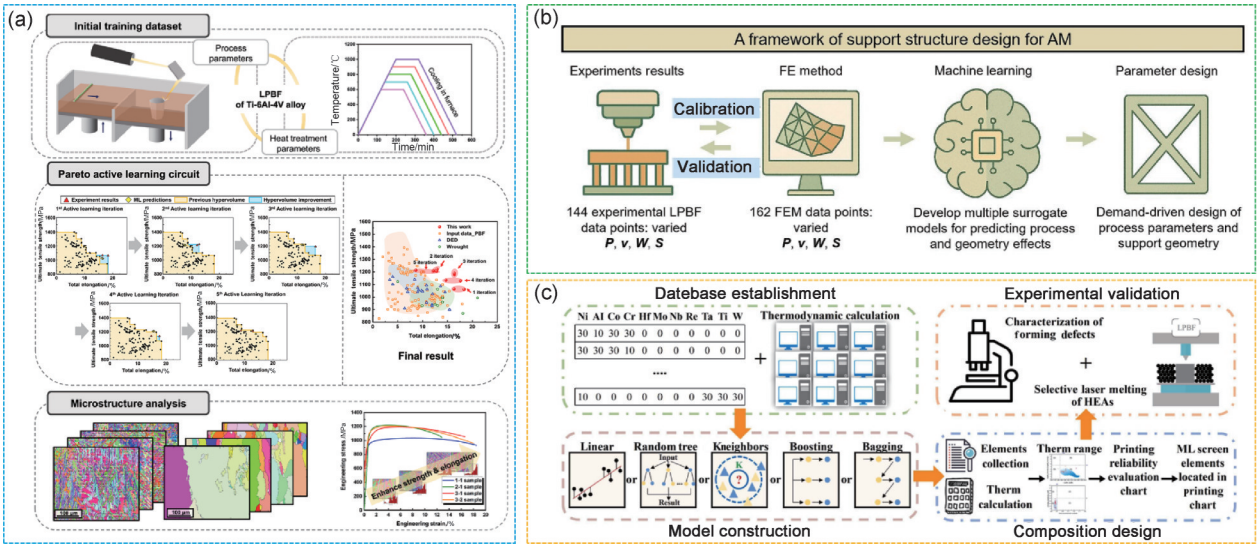


图 6 ML 在 AM 合金中的几种典型应用策略

(a)具有优异力学性能的 Ti-6Al-4V 合金 ML 辅助开发工作流程的 3 个组成部分[88];(b)用于 AM 结构分析的数据驱动框架[89];(c)LPBF-HEAs ML 设计系统示意图[90]

Fig.6 Several typical application strategies of ML in AM alloys

(a)three components of the ML-assisted development workflow for Ti-6Al-4V alloy with excellent mechanical properties[88]; (b)a data-driven framework for structural analysis in AM[89]; (c)schematic diagram of the LPBF-HEAs ML design system[90]

与道间距的高密度 LPBF 工艺数据库,利用高斯回归结合贝叶斯优化的方法,对三维工艺空间进行了高效搜索,并通过 ML 识别出传统经验难以得到的高功率、高速稳定打印区域,并揭示不同热输入条件对熔池深宽比、热梯度、冷却速率及 β 晶粒形貌的影响,不仅实现了缺陷可控化,还可对凝固组织演化定向调控。在微观组织表征方面,Wittwer 等[92]提出了一种面向增材制造金属的高通量微观组织分析方法,通过将定向反射显微与卷积神经网络相结合,实现了对 DED 成形 Inconel 718 中晶体取向的快速预测。该方法能够从光学反射信号直接映射晶体学取向,预测误差仅为 6°~7°,表征效率显著高于传统 EBSD。更重要的是,该数据驱动框架能够捕捉柱状晶生长、取向梯度及熔池相关组织特征,从而为建立“工艺参数-熔池热史-凝固组织”之间的定量关系提供了新的手段。Su 课题组[93]进一步提出基于 AM 冶金约束的 ML 框架,如图 7 所示。综合考虑凝固区间、热裂敏感性与碳化物析出行为等因素。在 FeCrCoC 不锈钢体系中,通过激光定向能量沉积工艺实现了屈服强度 1062~1769 MPa、伸长率 2.1%~11.7% 的宽范围性能调控,验证了在复杂工艺空间中进行性能导向设计的可行性。这些研究为 AM 工艺优化与性能预测奠定了方法论基础,也为多主元复杂体系的深入研究提供了技术借鉴。

在激光 AM 高熵合金研究领域,ML 技术已成功应用于相结构预测、成形性能评估与多目标优化等多个关键方向。Duan 等[90]创新性地将随机森林算法与 JMatPro 热力学计算相结合,开发了面向激光粉末床熔融工艺的高熵合金可打印性设计方法。该研究构建了涵盖液体黏度、凝固温度区间、收缩率与模量比等关键参数的预测图谱,并在 Co-Cr-Nb-Ni-Ti 合金体系中进行了实验验证,成功制备出致密度达 99.96% 的高质量成形件。Zhou 等[94]采用 TabNet 深度学习架构,结合激光功率与扫描速度等工艺参数,构建了多阶段数据增强预测系统。该模型将 $CoCr_xFeNiMnV$ (x=0.25~1)合金的相结构预测准确率从 86.96% 显著提升至 91.23%,展现了深度学习在复杂合金体系中的优越性。Tan 团队[95]针对选区激光熔化成形试样开发了同步预测相结构与力学性能的 ML 框架,仅需输入体积能量密度与原子半径差两个关键变量,贝叶斯模型即可实现 93.8% 的相分类准确率,随机森林模型预测抗拉强度、屈服强度与伸长率的误差分别控制在 10.3%、8.6% 与 28.5%。实验制备的 FeCrNiAlTi 双相合金展现出 1267 MPa 极限抗拉强度与 5% 伸长率的优异强塑性匹配。Nelaturu 等[96]将主动学习机制引入定向能量沉积过程,以 Cr-Fe-Mn-Ni 四元体系为研究对象,通过晶格畸变特征的线性规划分析成功识别出高硬度候选成分。研究结果显示,最优合金硬度达到 310.7HV,充分验证了 AM 与 ML 协同优化策略在材料设计中的可行性与有效性。

相较于传统高熵合金,RHEAs 因其更高的熔点和

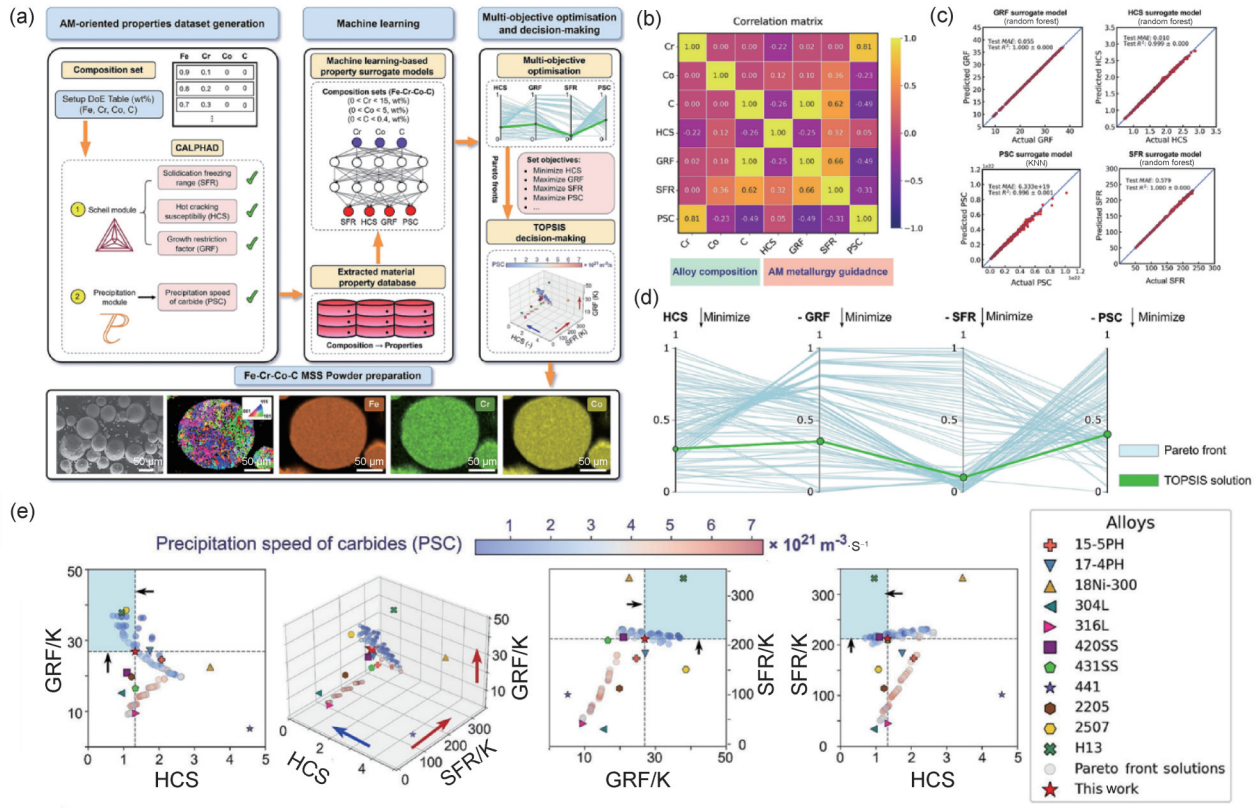


图 7　AM 冶金指导通用合金的 ML 设计应用[93]

(a)集成冶金学知识的 AM 马氏体钢设计 ML 框架示意图;(b)合金成分与 CALPHAD 模拟性能之间的 Spearman 相关矩阵;(c)ML 代理模型预测性能;(d)帕累托前沿解的平行坐标图,绿色高亮显示 TOPSIS 优选解;(e)帕累托前沿解与 TOPSIS 优选解的 3D 与 2D 散点图,并与商用高强度钢进行性能比较

Fig.7　ML-driven design application for general alloys guided by AM metallurgy[93]

(a)schematic diagram of the ML framework for AM martensitic steel design integrating metallurgical knowledge;(b)Spearman correlation matrix between alloy composition and CALPHAD simulation performance;(c)predictive performance of ML proxy models;(d)parallel coordinate graph of the Pareto frontier solution, with the TOPSIS preferred solution highlighted in green;(e)3D and 2D scatter plots of the Pareto frontier solution and the TOPSIS preferred solution, and performance comparisons with commercial high-strength steel

更宽的凝固区间,在 AM 过程中更容易出现热裂纹和成分偏析等缺陷[97-99]。针对这一挑战,Oriola 团队[100]创新性地提出了融合 ML 与热力学计算的综合评估方法。通过系统分析 100 种典型 RHEAs 样本,研究建立了温度参数及模量比 G/B 与延性参数 D 之间的定量关系。实验数据明确显示,裂纹长度与凝固区间、液相线温度呈显著正相关(相关系数 0.84~0.89),而与 G/B 值呈负相关($r=-0.90$)。基于此提出的 AMI $\propto 1/(\Delta T\times \mathrm{TL})$ 评价指标在对比材料中表现出优异的区分能力:HfNbTiZr 合金因其窄凝固区间和低液相线温度而无裂纹产生,而 MoNbTiV-Zr/AlMoTaTiV 合金则因宽凝固区间而出现明显开裂,充分验证了该指标的有效性。Lu 等[101]综述研究进一步证实,结合高通量激光 AM 与 ML 技术已成为探索 RHEAs 成分-组织-性能关系的有效途径。采用激光工程净成形与金属沉积等先进技术,研究人员能够实现快速成分梯度打印,并借助 ML 模型高效预测相结构与力学性能。

上述研究初步构建了 RHEAs 在 AM 过程中热力学特性、力学性能与可加工性之间的定量关联模型,展现出 ML 在抗裂性能预测、相稳定性判断与工艺窗口优化等方面的巨大应用潜力。ML 技术正推动 AM 从经验依赖型向数据驱动型转变,工艺调控方式逐步被智能设计所替代。具体而言,在传统合金中,ML 已能实现工艺参数与材料性能的精准匹配;在高熵合金中,其应用进一步拓展至相结构预测与多目标性能设计;而在 RHEAs 中,更显示出在可制造性评估与组织调控方面的独特价值。

尽管如此,当前研究仍面临高质量数据匮乏、样本分布不均衡、模型跨体系迁移能力不足等挑战。未来研究应致力于构建覆盖成分、工艺、组织与性能的多模态数据库,发展先进的小样本学习方法,并结合不确定性量化与主动学习策略构建智能优化框架。

在此基础上，实现从打印参数、熔池动力学到相结构演化的多尺度精准预测将成为可能。随着ML与AM技术的深度融合，RHEAs有望实现从“可打印”到“可设计”的根本性跨越，成为智能制造背景下极具战略价值的研究方向之一[102-103]。

5 总结与挑战

随着数据科学与材料科学的深度融合，ML在AM RHEAs设计中展现出独特价值。该方法通过高效处理AM特有的高维度工艺参数与复杂非平衡凝固行为，建立了从“粉末特性-工艺参数-熔池动力学-微观组织-宏观性能”的全流程智能设计框架。在激光粉末床熔融、定向能量沉积等典型AM工艺中，ML不仅能够预测非平衡凝固过程中的相结构演变和组织演化规律，还能实现孔隙、裂纹等成形缺陷的主动控制与多目标性能协同优化。

尽管当前已取得阶段性成果，该领域仍面临若干关键挑战：

(1)AM专用数据匮乏。现有数据在激光-材料相互作用、熔池动态行为、快速凝固路径等关键环节存在大量空白，不同设备工艺特性差异导致数据标准化程度低，严重制约了模型的准确性与泛化能力。

(2)多物理场耦合建模复杂性。AM过程涉及热-流-固多物理场耦合，具体表现为熔池快速凝固、非平衡相变、元素偏析等复杂物理过程。传统数据驱动方法在描述此类复杂物理行为时存在明显局限，同时缺乏高时空分辨率的实验数据支持模型训练，导致模型跨平台外推的稳定性和可靠性面临严峻挑战。

(3)AM多目标优化体系尚未完善。当前优化模型难以同时兼顾成形质量、微观组织、力学性能等多重目标，在平衡致密度、残余应力、晶粒形态等AM关键指标方面存在明显不足。

(4)模型可解释性与验证机制不足。主要问题包括：模型“黑箱”特性制约了结果的可信度和推广性；预测与实验验证之间缺乏高效的闭环反馈机制；对于高成本材料体系，验证周期长、成本高；缺乏快速迭代和自我修正能力。

未来研究的重点突破方向应聚焦于数据基础设施的系统化建设、机理模型与数据驱动的深度耦合、多目标优化问题的智能求解以及设计流程的快速闭环：

(1)构建标准化AM数据集。建立覆盖“成分-工艺-组织-性能”全链条的数据体系，制定统一的数据结构，引入不确定性量化提升数据可靠性。通过建立可共享的数据平台促进数据融合，为ML驱动的可制造性预测与性能优化提供稳定数据基础。

(2)发展物理机理与数据驱动融合模型。将CALPHAD、相场模拟等物理模型作为约束条件，采用图神经网络、物理信息神经网络等新兴算法，结合SHAP值分析和因果推断技术，显著提升模型的物理合理性和外推能力。

(3)建立多目标协同优化体系。引入多目标进化算法和贝叶斯优化方法，开发考虑强度、塑性、热稳定性等多重指标的优化框架，强化ML模型与优化算法的深度耦合，提高Pareto前沿的覆盖度和实用性。

(4)构建快速闭环验证系统。基于主动学习策略优先选择高价值样本，结合小批量AM与快速表征技术，建立模型自修正和快速迭代机制，显著提升从预测到验证的全流程效率。

(5)推进跨尺度智能设计方法。将ML与数字孪生技术相结合，实现从粉末特性到服役性能的全周期模拟，突破实验室尺度的设计局限，最终实现工程构件级别的性能可控。

ML技术正逐渐成为推动AM RHEAs“经验试错”向“数字孪生”转变的核心驱动力。通过建立覆盖AM全链条的智能设计体系，将实现从材料设计、工艺优化到构件性能的精准预测与控制，为航空航天、能源装备等领域提供新一代高性能定制化构件解决方案，推动AM技术向智能化、精准化方向跨越式发展。

参考文献

[1] YEH 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] TSAI M H, YEH J W. High-entropy alloys: a critical review[J]. Materials Research Letters, 2014, 2(3): 107-123.

[3] CHENG C Y, YANG Y C, ZHONG Y Z, et al. Physical metallurgy of concentrated solid solutions from low-entropy to high-entropy alloys[J]. Current Opinion in Solid State and Materials Science, 2017, 21(6): 299-311.

[4] YE Y F, LIU C T, YANG Y. A geometric model for intrinsic residual strain and phase stability in high entropy alloys[J]. Acta Materialia, 2015, 94: 152-161.

[5] CHANG S Y, LI C E, HUANG Y C, et al. Structural and thermodynamic factors of suppressed interdiffusion kinetics in multi-component high-entropy materials[J]. Scientific Reports, 2014, 4: 4162.

[6] HSU W L, TSAI C W, YEH A C, et al. Clarifying the four core effects of high-entropy materials[J]. Nature Reviews Chemistry,

2024,8(6):471-485.

[7] SENKOV O N,SCOTT J M,SENKOVA S V,et al.Microstructure and elevated temperature properties of a refractory TaNbHfZrTi alloy[J].Journal of Materials Science,2012,47(9):4062-4074.

[8] GORR B,AZIM M,CHRIST H J,et al.Phase equilibria,microstructure,and high temperature oxidation resistance of novel refractory high-entropy alloys[J].Journal of Alloys and Compounds,2015,624:270-278.

[9] ATLI K C,KARAMAN I.A short review on the ultra-high temperature mechanical properties of refractory high entropy alloys[J].Frontiers in Metals and Alloys,2023,2:1135826.

[10] ABDULLAH M R,PENG Z.Review and perspective on additive manufacturing of refractory high entropy alloys[J].Materials Today Advances,2024,22:100497.

[11] 龙俊丞,李彦生,吴渊.增材制造难熔高熵合金研究进展[J].航空材料学报,2026,46(1):15-29.
LONG J C,LI Y S,WU Y.Research progress on additive manufacturing of refractory high entropy alloys[J].Journal of Aeronautical Materials,2026,46(1):15-29.

[12] XIE X C,LI N,LIU W,et al.Research progress of refractory high entropy alloys:a review[J].Chinese Journal of Mechanical Engineering,2022,35:142.

[13] SUN Y B,NI J.Machine learning advances in high-entropy alloys:a mini-review[J].Entropy,2024,26(12):1119.

[14] WEI Z,HE Q,ZHAO Y.Machine learning for battery research[J].Journal of Power Sources,2022,549:232125.

[15] CHENG Y H,WANG L F,YANG C Y,et al.A brief review of machine learning-assisted Mg alloy design,processing,and property predictions[J].Journal of Materials Research and Technology,2024,30:8108-8127.

[16] MORGAN D,PILANIA G,COUET A,et al.Machine learning in nuclear materials research[J].Current Opinion in Solid State and Materials Science,2022,26(2):100975.

[17] HE Q F,WANG J G,CHEN H A,et al.A highly distorted ultra-elastic chemically complex Elinvar alloy[J].Nature,2022,602(7896):251-257.

[18] WANG H,YANG P Y,ZHAO W J,et al.Lattice distortion enabling enhanced strength and plasticity in high entropy intermetallic alloy[J].Nature Communications,2024,15:6782.

[19] 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.
GAO T C,GAO J B,LI Q,et al.Current status and prospects in machine learning-driven design for refractory high-entropy alloys[J].Journal of Materials Engineering,2024,52(1):27-44.

[20] SRIKANTH M,ANNAMALAI A R,MUTHUCHAMY A,et al.A review of the latest developments in the field of refractory high-entropy alloys[J].Crystals,2021,11(6):612.

[21] MIRACLE D B,SENKOV O N.A critical review of high entropy alloys and related concepts[J].Acta Materialia,2017,122:448-511.

[22] KONG L J,CHENG B,WAN D,et al.A review on BCC-structured high-entropy alloys for hydrogen storage[J].Frontiers in Materials,2023,10:1135864.

[23] WANG M,MA Z L,XU Z Q,et al.Microstructures and mechanical properties of HfNbTaTiZrW and HfNbTaTiZrMoW refractory high-entropy alloys[J].Journal of Alloys and Compounds,2019,803:778-785.

[24] YAO H W,QIAO J W,HAWK J A,et al.Mechanical properties of refractory high-entropy alloys:experiments and modeling[J].Journal of Alloys and Compounds,2017,696:1139-1150.

[25] SENKOV O N,GORSSE S,MIRACLE D B.High temperature strength of refractory complex concentrated alloys[J].Acta Materialia,2019,175:394-405.

[26] CHEN B.Progress in additive manufacturing of high-entropy alloys[J].Materials,2024,17(23):5917.

[27] GHOMASHCHI R,NAFISI S.Solidification of Al12Si melt pool in laser powder bed fusion[J].Journal of Materials Engineering and Performance,2023,32(23):10943-10955.

[28] DOBBELSTEIN H,GUREVICH E L,GEORGE E P,et al.Laser metal deposition of a refractory TiZrNbHfTa high-entropy alloy[J].Additive Manufacturing,2018,24:386-390.

[29] 蓝杭,鲁凯举,仝永刚,等.增材制造难熔铌合金的新机遇[J].稀有金属材料与工程,2026,55(1):250-265.
LAN H,LU K J,TONG Y G,et al.New opportunities in refractory niobium alloys *via* additive manufacturing[J].Rare Metal Materials and Engineering,2026,55(1):250-265.

[30] DOBBELSTEIN H,THIELE M,GUREVICH E L,et al.Direct metal deposition of refractory high entropy alloy MoNbTaW[J].Physics Procedia,2016,83:624-633.

[31] DOBBELSTEIN H,GEORGE E P,GUREVICH E L,et al.Laser metal deposition of refractory high-entropy alloys for high-throughput synthesis and structure-property characterization[J].International Journal of Extreme Manufacturing,2021,3(1):015201.

[32] XU J T,DUAN R,FENG K,et al.Enhanced strength and ductility of laser powder bed fused NbMoTaW refractory high-entropy alloy *via* carbon microalloying[J].Additive Manufacturing Letters,2022,3:100079.

[33] KNAISLOVÁ A,RUDOMILOVA D,NOVÁK P,et al.Critical assessment of techniques for the description of the phase composition of advanced high-strength steels[J].Materials,2019,12(24):4033.

[34] MOORAJ S,KIM G,FAN X S,et al.Additive manufacturing of defect-free TiZrNbTa refractory high-entropy alloy with enhanced elastic isotropy *via in-situ* alloying of elemental powders[J].Communications Materials,2024,5:14.

[35] SIVARAJ B K,NITHEESH KUMAR R,KARTHIK V.Computational modeling of additive manufacturing—overview,principles,and simulations in different scales[M]//Additive manufacturing with novel materials.Hoboken,NJ:Wiley-Scrivener,2024:49-118.

[36] KÖRNER C.Additive manufacturing of metallic components by selective electron beam melting:a review[J].International Materials Reviews,2016,61(5):361-377.

[37] POPOV V V,KATZ-DEMYANETZ A,KOPTYUG A,et al.

Selective electron beam melting of $Al_{0.5}CrMoNbTa_{0.5}$ high entropy alloys using elemental powder blend[J]. Heliyon, 2019, 5(2):e01188.

[38] KATZ-DEMYANETZ A, GORBACHEV I I, ESHED E, et al. High entropy $Al_{0.5}CrMoNbTa_{0.5}$ alloy: additive manufacturing *vs.* casting *vs.* CALPHAD approval calculations[J]. Materials Characterization, 2020, 167: 110505.

[39] EMERLA M, BAZARNIK P, HUANG Y, et al. Using direct high-pressure torsion synthesis to produce aluminium matrix nanocomposites reinforced with carbon nanotubes[J]. Journal of Alloys and Compounds, 2023, 968: 171928.

[40] GILES S A, SENGUPTA D, BRODERICK S R, et al. Machine-learning-based intelligent framework for discovering refractory high-entropy alloys with improved high-temperature yield strength[J]. npj Computational Materials, 2022, 8: 235.

[41] IBARRA-HOYOS D, SIMMONS Q, POON S J. Comparing machine learning models for strength and ductility in high-entropy alloys[J]. High Entropy Alloys & Materials, 2025, 3(1): 101-114.

[42] 何玄, 宋鹏, 孔德昊, 等. 机器学习技术在航空材料领域的应用[J]. 航空材料学报, 2025, 45(3): 85-104.
HE X, SONG P, KONG D H, et al. Application of machine learning technology in field of aviation materials[J]. Journal of Aeronautical Materials, 2025, 45(3): 85-104.

[43] ZHAO D Q, PAN S P, ZHANG Y, et al. Structure prediction in high-entropy alloys with machine learning[J]. Applied Physics Letters, 2021, 118(23): 231904.

[44] PATURI U M R, ISHTIAQ M, LAKSHMI NARAYANA P, et al. Evaluating machine learning models for predicting hardness of AlCoCrCuFeNi high-entropy alloys [J]. Crystals, 2025, 15(5): 404.

[45] ZHOU Z Q, ZHOU Y J, HE Q F, et al. Machine learning guided appraisal and exploration of phase design for high entropy alloys[J]. npj Computational Materials, 2019, 5: 128.

[46] ZHANG L, QIAN K, SCHULLER B W, et al. Prediction on mechanical properties of non-equiatomic high-entropy alloy by atomistic simulation and machine learning [J]. Metals, 2021, 11(6): 922.

[47] ROY A, BALASUBRAMANIAN G. Predictive descriptors in machine learning and data-enabled explorations of high-entropy alloys[J]. Computational Materials Science, 2021, 193: 110381.

[48] BHANDARI U, GHADIMI H, ZHANG C Y, et al. Predicting elastic constants of refractory complex concentrated alloys using machine learning approach[J]. Materials, 2022, 15(14): 4997.

[49] ZHANG Y, WEN C, WANG C X, et al. Phase prediction in high entropy alloys with a rational selection of materials descriptors and machine learning models[J]. Acta Materialia, 2020, 185: 528-539.

[50] HUANG W J, MARTIN P, ZHUANG H L. Machine-learning phase prediction of high-entropy alloys[J]. Acta Materialia, 2019, 169: 225-236.

[51] KHAKUREL H, TAUFIQUE M F N, ROY A, et al. Machine learning assisted prediction of the Young's modulus of compositionally complex alloys[J]. Scientific Reports, 2021, 11: 17149.

[52] GAO Y, BAI S S, CHONG K, et al. Machine learning accelerated design of non-equiatomic refractory high entropy alloys based on first principles calculation[J]. Vacuum, 2023, 207: 111608.

[53] SWATEELAGNA S, SINGH M, RAHUL M R. Explainable machine learning based approach for the design of new refractory high entropy alloys[J]. Intermetallics, 2024, 167: 108198.

[54] PAN H, ZHENG M J, LI X C, et al. Improved hardness prediction for reduced-activation high-entropy alloys by incorporating symbolic regression and domain adaptation on small datasets[J]. Journal of Materials Informatics, 2025, 5(1): 6.

[55] WEN C, ZHANG Y, WANG C X, et al. Machine learning assisted design of high entropy alloys with desired property[J]. Acta Materialia, 2019, 170: 109-117.

[56] ABDI H, WILLIAMS L J. Principal component analysis [J]. WIREs Computational Statistics, 2010, 2(4): 433-459.

[57] HSU T, EPTING W K, KIM H, et al. Microstructure generation *via* generative adversarial network for heterogeneous, topologically complex 3D materials[J]. JOM, 2021, 73(1): 90-102.

[58] KARPOVICH C, PAN E, OLIVETTI E A. Deep reinforcement learning for inverse inorganic materials design[J]. npj Computational Materials, 2024, 10: 287.

[59] XIAN Y H, DANG P F, TIAN Y, et al. Compositional design of multicomponent alloys using reinforcement learning[J]. Acta Materialia, 2024, 274: 120017.

[60] CORTES C, VAPNIK V. Support-vector networks[J]. Machine Learning, 1995, 20(3): 273-297.

[61] HOFMANN T, SCHÖLKOPF B, SMOLA A J. Kernel methods in machine learning[J]. The Annals of Statistics, 2008, 36(3): 1171-1220.

[62] COVER T, HART P. Nearest neighbor pattern classification[J]. IEEE Transactions on Information Theory, 1967, 13(1): 21-27.

[63] QUINLAN J R. Induction of decision trees[J]. Machine Learning, 1986, 1(1): 81-106.

[64] BREIMAN L. Random forests[J]. Machine Learning, 2001, 45(1): 5-32.

[65] BENTÉJAC C, CSÖRGŐ A, MARTÍNEZ-MUÑOZ G. A comparative analysis of gradient boosting algorithms[J]. Artificial Intelligence Review, 2021, 54(3): 1937-1967.

[66] NAVEEN L, UMRE P, CHAKRABORTY P, et al. Development of single-phase BCC refractory high entropy alloys using machine learning techniques[J]. Computational Materials Science, 2024, 238: 112917.

[67] GAO T C, GAO J B, YANG S L, et al. Data-driven design of novel lightweight refractory high-entropy alloys with superb hardness and corrosion resistance[J]. npj Computational Materials, 2024, 10: 256.

[68] PEIVASTE I, JOSSOU E, TIAMIYU A A. Data-driven analysis and prediction of stable phases for high-entropy alloy design[J]. Scientific Reports, 2023, 13: 22556.

[69] XU G, NIU G, WANG Y W, et al. Machine learning-based research of new refractory high-entropy alloys using guided multiobjectives search strategy[J]. Materials Genome Engineering Advances, 2025, 3(4): e70030.

[70] HE J Y, LI Z Z, LIN J C, et al. Machine learning-assisted design

of refractory high-entropy alloys with targeted yield strength and fracture strain[J].Materials & Design,2024,246:113326.

[71] GONG J J,LI Y,LIANG S L,et al.Efficient alloy design strategy for fast searching for high-entropy alloys with desired mechanical properties[J].Materials & Design,2024,245:113260.

[72] RAMAN L,DEBNATH A,FURTON E,et al.Data-driven inverse design of MoNbTiVWZr refractory multicomponent alloys:microstructure and mechanical properties[J]. Materials Science and Engineering:A,2024,918:147475.

[73] BHANDARI U,RAFI M R,ZHANG C Y,et al.Yield strength prediction of high-entropy alloys using machine learning[J].Materials Today Communications,2021,26:101871.

[74] ZHAO S,LI J S,WANG J,et al.Closed-loop inverse design of high entropy alloys using symbolic regression-oriented optimization[J].Materials Today,2025,88:263-271.

[75] WEN C,SHEN H C,TIAN Y W,et al.Accelerated discovery of refractory high-entropy alloys for strength-ductility co-optimization:an exploration in NbTaZrHfMo system by machine learning[J].Scripta Materialia,2024,252:116240.

[76] CATAL A A,BEDIR E,YILMAZ R,et al.Machine learning assisted design of novel refractory high entropy alloys with enhanced mechanical properties[J].Computational Materials Science,2024,231:112612.

[77] ZHAO S,LI J S,LIAO W J,et al.Machine learning-guided plasticity model in refractory high-entropy alloys[J]. Materials Genome Engineering Advances,2025,3(2):e70022.

[78] 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, 239:112797.

[79] LI Y,GONG J J,LIANG S L,et al.Machine learning-assisted design of Ti-V-Nb-Mo refractory high-entropy alloys with higher ductility and specific yield strength[J]. Journal of Materials Research and Technology,2025,34:1732-1743.

[80] ZHENG S L,YANG L W,FANG L Y,et al.Exploration of ductility for refractory high entropy alloys *via* interpretive machine learning[J].Journal of Materials Research and Technology,2025,37:1243-1256.

[81] LI L,WANG S,SU C,et al.Machine learning assisted design of CrTaTiV-based refractory high entropy alloys with enhanced hardness[J].International Journal of Refractory Metals and Hard Materials,2025,133:107400.

[82] ZHANG Y,ZUO T T,TANG Z,et al.Microstructures and properties of high-entropy alloys[J]. Progress in Materials Science,2014,61:1-93.

[83] SENKOV O N,MIRACLE D B,CHAPUT K J,et al.Development and exploration of refractory high entropy alloys:a review[J].Journal of Materials Research,2018,33(19):3092-3128.

[84] SINGH S K, MAHANTA B K, RAWAT P, et al. Machine learning-assisted design of high-entropy alloys for optimal strength and ductility[J].Journal of Alloys and Compounds,2024,1007:176282.

[85] THAPLIYAL S,ZHANG H Z,SAN S,et al.Unveiling atomistic mechanisms governing additive manufacturing processability and mechanical behavior of a refractory complex concentrated alloy[J].Advanced Functional Materials,2025,35:e21201.

[86] RON T, SHIRIZLY A, AGHION E. Additive manufacturing technologies of high entropy alloys (HEA):review and prospects[J].Materials,2023,16(6):2454.

[87] ACEMI C,VELA B,NORRIS E,et al.Multi-objective,multi-constraint high-throughput design,synthesis,and characterization of tungsten-containing refractory multi-principal element alloys[J].Acta Materialia,2024,281:120379.

[88] LEE J A,PARK J,SAGONG M J,et al.Active learning framework to optimize process parameters for additive-manufactured Ti-6Al-4V with high strength and ductility[J].Nature Communications,2025,16:931.

[89] MO Y,SU J L,LI Q Z,et al.Machine learning-driven design of support structures and process parameters in additive manufacturing[J].Virtual and Physical Prototyping,2025,20(1):e2525988.

[90] DUAN R,XU J T,ZHAO Y K,et al.High entropy alloys amenable for laser powder bed fusion:a thermodynamics guided machine learning search [J]. Additive Manufacturing, 2024, 86:104195.

[91] MONTALBANO T,NIMER S,DAFFRON M,et al.Machine learning enabled discovery of new L-PBF processing domains for Ti-6Al-4V[J].Additive Manufacturing,2025,98:104632.

[92] WITTWER M,SEITA M.A machine learning approach to map crystal orientation by optical microscopy[J]. npj Computational Materials,2022,8:8.

[93] SU J L,CHEN L Q,VAN PETEGEM S,et al.Additive manufacturing metallurgy guided machine learning design of versatile alloys[J].Materials Today,2025,88:240-250.

[94] ZHOU C,ZHANG Y Z,XIN H Y,et al.Complex multiphase predicting of additive manufactured high entropy alloys based on data augmentation deep learning[J].Journal of Materials Research and Technology,2024,28:2388-2401.

[95] TAN X J,LU Q H,CHEN D H,et al. Machine learning prediction of phase and tensile properties of high entropy alloys manufactured by selective laser melting[J].Materials Today Communications,2024,41:110209.

[96] NELATURU P,HATTRICK-SIMPERS J R,MOOREHEAD M,et al.Multi-principal element alloy discovery using directed energy deposition and machine learning[J]. Materials Science and Engineering:A,2024,891:145945.

[97] KIM J,WAKAI A,MORIDI A.Materials and manufacturing renaissance:additive manufacturing of high-entropy alloys[J].Journal of Materials Research,2020,35(15):1963-1983.

[98] 张文军,伊浩,曹华军,等.难熔高熵合金激光增材制造:研究进展与展望[J].稀有金属,2023,47(5):601-617.
ZHANG W J,YI H,CAO H J,et al.Laser additive manufacturing of refractory high entropy alloys:research progress and prospects[J].Chinese Journal of Rare Metals,2023,47(5):601-617.

[99] 孙博,夏铭,张志彬,等.难熔高熵合金性能调控与增材制造[J].材料工程,2020,48(10):1-16.
SUN B,XIA M,ZHANG Z B,et al.Property tuning and additive

manufacturing of refractory high-entropy alloys[J]. Journal of Materials Engineering, 2020, 48(10): 1-16.

[100] ORIOLA A T, MAILE J D, NGUYEN A, et al. Toward an index for predicting additive manufacturability of refractory high-entropy alloys[J]. JOM, 2025, 77(10): 7222-7234.

[101] LU Z C, MA D, LIU X J, et al. High-throughput and data-driven machine learning techniques for discovering high-entropy alloys [J]. Communications Materials, 2024, 5: 76.

[102] LIU Z Z, ZHOU Q H, LIANG X K, et al. Alloy design for laser powder bed fusion additive manufacturing: a critical review[J]. International Journal of Extreme Manufacturing, 2024, 6(2): 022002.

[103] 李俊炎, 张伟强, 高志玉. 机器学习辅助高熵合金设计的研究进展[J]. 材料导报, 2025, 39(18): 218-227.
LI J Y, ZHANG W Q, GAO Z Y. Advances in machine learning-aided design of high-entropy alloys[J]. Materials Reports, 2025, 39(18): 218-227.

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(52475413)

收稿日期: 2025-11-07; **录用日期**: 2025-12-12

通讯作者: 崔秀芳(1978—), 女, 教授, 博士, 研究方向为表面工程、再制造、摩擦学等, 联系地址: 黑龙江省哈尔滨市南岗区南通大街145号哈尔滨工程大学材料科学与化学工程学院(150001), E-mail: cuixf721@163.com; 鲁凯举(1993—), 男, 助理研究员, 博士, 研究方向为高熵合金设计和成形, 联系地址: 北京市丰台区国防科技创新研究院(100071), E-mail: kaijulucky@163.com; 梁秀兵(1974—), 男, 研究员, 博士, 研究方向为高熵合金设计和成形, 联系地址: 北京市丰台区国防科技创新研究院(100071), E-mail: liangxb_d@163.com

(本文责编: 寇凤梅)