

数据驱动范式下微波介质陶瓷材料及器件研究进展

秦锦成^{1,2}, 刘志甫^{1,2}, 马名生^{1,2}, 李永祥¹

(1. 中国科学院上海硅酸盐研究所无机功能材料与器件重点实验室, 上海 201899;

2. 中国科学院大学材料科学与光电工程中心, 北京 100049)

摘 要: 机器学习等数据驱动方法能够快速发掘数据之间潜在的统计相关性, 实现目标量的高效精准预测, 并辅助分析数据背后的物理图像, 已被广泛应用于材料性能预测和器件设计的研究之中。近年来, 机器学习模型研究在微波介质陶瓷材料及器件开发中也取得了系列进展。本文介绍了机器学习方法的基本原理和过程, 重点总结了微波介质陶瓷的介电常数、品质因数等关键性能的机器学习预测模型研究的最新进展, 探讨了材料成分、结构、工艺等参数与微波介电性能之间的关系, 并概述了机器学习方法在微波天线和滤波器的尺寸优化、失效分析等方面的应用。最后, 指出了数据驱动研究在微波介质陶瓷材料及器件领域的若干发展方向。

关键词: 数据驱动范式; 机器学习; 微波介质陶瓷; 介电性能; 微波器件

中图分类号: TB3; TP3 文献标志码: A 文章编号: 0454-5648(2023)04-0921-13

网络出版时间: 2023-03-07



Research Progress on Dielectric Ceramics and Devices Within Data-Driven Paradigm

QIN Jincheng^{1,2}, LIU Zhifu^{1,2}, MA Mingsheng^{1,2}, LI Yongxiang¹

(1. CAS Key Laboratory of Inorganic Functional Materials and Devices, Shanghai Institute of Ceramics, Chinese Academy of Sciences, Shanghai 201899, China; 2. Center of Materials Sciences and Optoelectronics Engineering, University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China)

Abstract: Data-driven methods including machine learning are widely used in materials properties prediction and devices design due to their abilities to discover the underlying statistical correlations from data, achieve target prediction efficiently and accurately, and assist in the analysis of physical images behind the data. In recent years, machine learning modeling in the research of dielectric ceramics and devices becomes popular. Recent development on the research of machine learning prediction models for key properties (i.e., dielectric constant and quality factor of microwave dielectric ceramics) was represented. Machine learning methods in dimensional optimization, failure analysis, etc. for antennas and filters were also introduced. In addition, some prospects of data-driven studies in materials and devices were also provided.

Keywords: data-driven paradigm; machine learning; microwave dielectric ceramics; dielectric properties; microwave devices

数据驱动的材料研究借助人工智能和数据科学方法, 直接分析材料数据之间的统计相关性, 挖掘出“成分-结构-工艺-性能”关系, 进而实现材料结构设计、成分调控、工艺优化和性能预测等目标^[1-5]。数据驱动的材料研究也被称为“材料信息学”^[6-8], 其中机器学习, 尤其是监督学习方法近年来受到电介

质材料领域的广泛关注^[9-12]。

微波介质陶瓷作为介质基板、介质天线、滤波器等通信器件的关键材料, 影响 5G 商业化进程。5G 高频、高速、低时延通信要求微波介质陶瓷具备优良的综合介电性能, 包括低介电常数(ϵ_r)、高品质因数($Q \times f$)和近零的谐振频率温度系数(τ_f)^[13-16]。低 ϵ_r

收稿日期: 2022-09-02。 修订日期: 2022-10-09。

基金项目: 国家自然科学基金面上项目(61871369); 上海市青年科技启明星计划项目(20QA1410200)。

第一作者: 秦锦成(1995—), 男, 博士研究生。

通信作者: 刘志甫(1975—), 男, 博士, 研究员;

马名生(1986—), 男, 博士, 副研究员。

Received date: 2022-09-02. Revised date: 2022-10-09.

First author: QIN Jincheng (1995—), male, Doctoral candidate.

E-mail: qinjc@student.sic.ac.cn

Correspondent author: LIU Zhifu (1975—), male, Ph.D., Professor.

MA Mingsheng (1986—), male, Ph.D., Associate Professor.

E-mail: liuzf@mail.sic.ac.cn; mamingsheng@mail.sic.ac.cn

值旨在降低信号时延,高 $Q \times f$ 值为满足高信噪比和良好选频特性,近零 τ_f 值则实现在宽温度范围内保持性能稳定性。此外,为匹配多层工艺技术和满足实际应用需求,商业化的微波介质陶瓷需具有合适的热膨胀系数、低烧结温度、高热导率、高强度和高耐腐蚀性等特性。近年来,数据驱动方法在预测微波介电常数、品质因数(介电损耗)、谐振频率温度系数等方面取得初步进展。机器学习方法也已经在介质天线(阵列)、滤波器等器件的设计和失效分析方面得到了广泛关注,并取得系列进展。本文对数据驱动范式下微波介质陶瓷性能预测与微波元器件设计等方面进行了综述。

1 数据驱动的材料/器件研究方法

数据驱动材料/器件研究的全流程包含 6 个基本步骤,即确定任务、收集数据、数据预处理、特征工程、模型建立和模型应用^[2, 17–21]。

数据驱动范式提供了如何解决问题的新方法,本质上是方法论的革新,而“解决问题”的前提是“提出问题”。材料研究者需要明确拟研究的问题,并将问题转为计算机可理解的任务。对于监督学习,首先需要确定目标量,并根据领域知识选择可能会影响目标量的特征量。选取特征量应符合可量化、可规范化、易获取性等 3 大原则。数据是数据驱动方法的基础,建立数据量大、质量高的数据集直接决定机器学习模型的准确性和可靠性。材料信息学的数据来源主要有 3 个,包括现成的数据库和文献、计算模拟和实验测试。若数据来源于公开的在线数据库,例如 Materials Project^[22], OQMD^[23], AFLOW^[24]等;若数据来源于手册、文献或专利等出版物,则需较为耗时的人工收集和整理,或可借助文本识别、自然语言处理等智能化手段辅助收集^[25–26];若无现成数据源可供获取,或出于避免不同数据源的数据误差等方面的原因,则需要采用常规或高通量计算和实验手段获取数据^[27–31]。原始数据往往需要经过数据预处理及特征工程才能用于机器学习建模。数据预处理旨在提高数据质量,实现方法主要有重复值排除、缺失值清除或插补、异常值清除或纠正,以及不均衡数据分布的处理等。特征工程则包含特征数据降维^[32–34]、离散型特征的向量转换等^[35–36]处理过程,使数据集更适合用于建模,以提高建模效率和准确性,便于厘清目标量和特征量之间的关系。经过数据预处理和特征工程等步骤,数据集可用于机器学习建模。机器学习数据

集至少分为训练集和测试集。通过随机取样等方式,按照一定比例(例如 7:3)将前述步骤获得的数据集分为 2 份,即训练集和测试集。前者用于模型训练,建立模型;后者则用于模型测试,评价模型表现的优劣。常用的机器学习建模算法包括:线性模型、logistic 回归、支持向量机、决策树、随机森林、梯度提升决策树、人工神经网络、K 近邻、朴素 Bayesian 等^[21, 37–38]。确定训练集、测试集和算法之后,则可以进行建模。虽然机器学习算法不依赖明确的代码指令就能从数据中学习规律,不断自动地迭代优化模型内部参数,但是存在一些参数依赖外部配置,不能通过学习获得。这一类参数被称为模型超参数。模型超参数的优化策略主要包括:随机搜索、网格搜索、Bayesian 优化、遗传算法等。超参数优化采用训练集中的部分数据,剩余数据则用于交叉验证,确认所选超参数组合是否最优。交叉验证过程一般采用 K 折交叉验证法、留一法等方法。模型测试采用决定系数(R^2),均方根误差(RMSE),标准差等指标评价模型的泛化能力,判定模型是否适合后续应用。模型应用指的是采用表现良好的模型对已知特征量、但未知目标量的样本进行目标量预测。在材料信息学中,模型应用一般是为了快速发现更高性能材料,指导新型材料设计与实验制备,或从特征量与目标量的分布关系中发现新规律。

2 微波介质陶瓷性能研究

决定微波介质陶瓷实际应用价值的 3 大介电性能指标包括:介电常数(ϵ_r)、品质因数($Q \times f$)和谐振频率温度系数(τ_f)。机器学习方法在无机材料或微波介质陶瓷的介电常数性能预测及构效关系分析中已经取得了长足进展,但对 $Q \times f$ 和 τ_f 值的研究尚处在初步阶段。

2.1 介电常数

为了快速开发微波介质谐振器和滤波器用的介质陶瓷,早在 2007 年 Scott 等^[39–40]采用反向传播人工神经网络(BP-ANN)方法建立了成分与介电常数之间的关系。数据集来源于文献,包含 700 种材料的成分和微波介电常数实验值。涉及材料主要包括碱土金属钛酸盐、碱土金属氧化物和过渡金属氧化物。特征量是 53 种不同元素的含量,目标量是介电常数。对于测试集数据,介电常数预测值和实际值的相关系数为 0.64,均方根误差为 13.21,在此基础上,该团队引入了多目标进化算法,寻找高介电常数、低过剩电荷和良好预测可靠性的微波介质陶瓷^[41],

发现 $\text{Cr}_{0.8}\text{Li}_2\text{Na}_{1.6}\text{O}_3$ 、 $\text{CrLi}_{2.6}\text{Na}_{0.5}\text{O}_3$ 等材料具有较高介电常数, 良好稳定性且预测结果可靠性高。

然而, 上述工作仅着眼于材料的元素成分设计, 所建立的“成分-介电常数”模型准确性并不高, 因为介电常数很大程度上还受到晶体结构的影响。得益于晶体材料描述符系统的建立, 近年来介电常数构效关系的机器学习模型研究日臻完善。Morita 等^[42]基于 1 364 种材料的密度泛函微扰理论(DFPT)计算的电子介电常数, 并通过领域知识和图网络 MEGNet 2 种方法分别选取特征量, 对应地采用支持向量回归(SVR)和深度神经网络(DNN)方法建立介电常数预测模型。领域知识驱动的 SVR 模型具备更好的解释性, 而图网络结合 DNN 模型预期获得更高的准确性。结果表明, SVR 模型表现良好(测试集 $R^2=0.86$, RMSE=0.99), 准确性甚至略高于 DNN 模型(测试集 $R^2=0.84$, RMSE=1.08), 表明领域知识驱动选取的特征量与电子介电常数有显著相关性。为了进一步分析构效关系, 研究者引入博弈论领域的沙普利加和性解释(SHAP)方法对每一个特征量进行重要性分析。图 1 是根据 SHAP 值对特征量进行重要性排序。在预测某一材料的电子介电常数的过程中, 特征量的 SHAP 值越正(负), 表明该特征量对该材料的电子介电常数的提升(降低)作用越显著。密度的 SHAP 值与电子介电常数呈显著的正相关, 这一关系在 Clausius-Mossotti 等经典介电计算模型中都有所反映: 密度越高, 单位体积电子越多, 电子介电常数越大。禁带宽度与电子介电常数呈负相关, 但 SHAP 值在负数段较为集中, 而在正数段较为分散。SHAP 值的不平衡分布反映随着较大的禁带宽度进一步提升, 电子介电常数下降的幅度越小, 这一现象与 Penn 模型 $[\epsilon \approx 1 + (\hbar\omega_p / E_g)^2]$ 中介电常数(ϵ)与禁带宽度(E_g)呈-2 次方规律类似(式中: $\hbar$ 为约化 Plank 常数; ω_p 为等离子体频率)。换言之, 若要开发新型低电子介电常数材料, 可从材料数据库中快速锁定低理论密度、高禁带宽度的物相进行实验验证。此外, 形成能、氧化态与 O^{2-} 、 F^- 和 Li^+ 等离子的摩尔分数与电子介电常数之间的统计规律也能通过现有理论得到合理解释, 对材料成分设计也具有指导作用。

Takahashi 等^[31]通过高通量 DFPT 计算了 1 266 种基态晶体氧化物的电子介电常数 ϵ_{el} 和离子介电常数 ϵ_{ion} , 并采用随机森林算法分别发现了 2 种介电常数与化学组成、晶体结构之间统计关系。对于 ϵ_{el} 和 ϵ_{ion} 的机器学习建模, 皆分为 2 个阶段: 1) 仅采

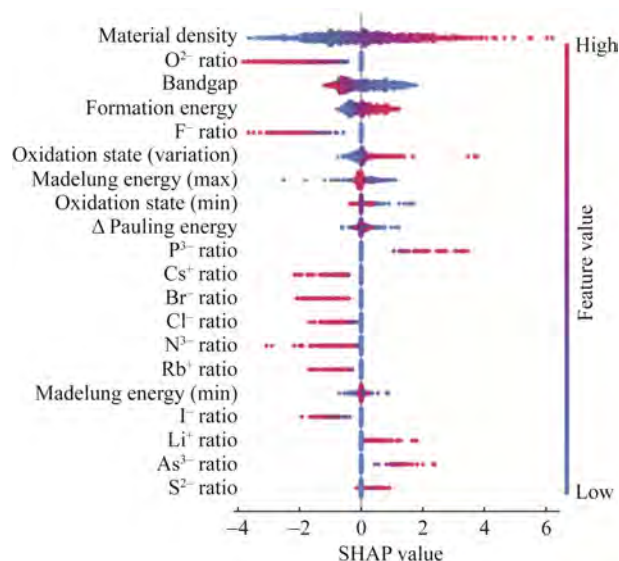


图 1 特征值与 SHAP 值的关系^[42]

Fig. 1 Relation between values of features and their SHAP values^[42]

用组成特征量; 2) 结合组成特征量和结构特征量。采用递归消除法从 600 余个初始特征量中选取最重要的用于最终建模。图 2 展示了 2 阶段 ϵ_{el} 和 ϵ_{ion} 最佳模型在训练集和测试集中的表现, 以及每个模型所用的特征量个数。对于 ϵ_{el} , 阶段 1 模型最重要的特征量为原子量平均值, 阶段 2 则为质量密度。通常原子量平均值越大, 阳离子半径越大, 则与氧离子形成的化学键越长, 降低 Madelung 势能, 禁带宽度也会随之降低。有研究表明禁带宽度与 ϵ_{el} 呈负相关, 因此 ϵ_{el} 提高。质量密度反映离子堆积致密度, 其值与单位体积电子数量密度和态密度呈正相关, 故也利于提高 ϵ_{el} 值。对于 ϵ_{ion} , 阶段 1 模型最重要特征量为元素周期表中周期数的标准差(SDR), 阶段 2 则近邻距离变化的平均值(MNDV)。提高 SDR 一方面会增大对应元素价电子的主量子数、Born 有效电荷, 另一方面会降低光学声子模式的最低频率, 都会提高 ϵ_{ion} 值。MNDV 是由 Voronoi 多边形划分法衍生的参数, 表示实际原子位置与高对称性位点的偏离程度。结构对称性越低, MNDV 越小, 从而降低光学声子频率, 增大 Born 有效电荷, 最终也会提高 ϵ_{ion} 值。综上所述, 降低 ϵ_{el} 值可选取原子量平均值较小的化合物, 并降低材料的质量密度; 降低 ϵ_{ion} 值则可选取由相近周期的元素所组成的材料, 并提高晶体结构对称性。

钙钛矿型介质陶瓷具有性能良好、结构简单且易调控、制备成本低等优点, 因此受到广泛关注。Noda 等^[43]通过第一性原理方法计算了 360 种氧化

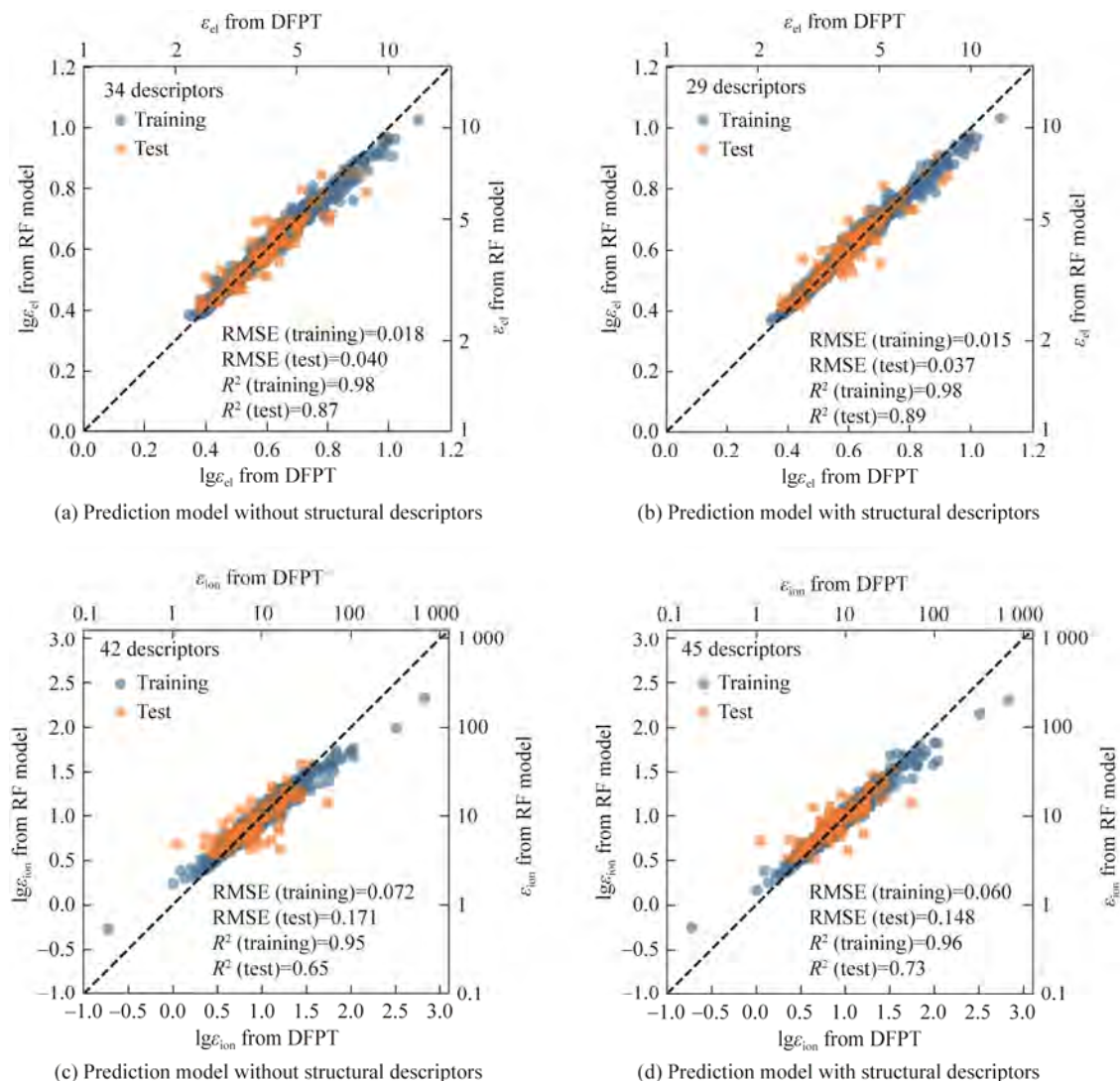


图2 电子介电常数 ϵ_{el} 和离子介电常数 ϵ_{ion} 的 DFPT 计算值和 ML 预测值对比^[31]

Fig. 2 Parity plots of the electronic dielectric constants ϵ_{el} and ionic dielectric constants ϵ_{ion} between the DFPT values and ML predicted values^[31]

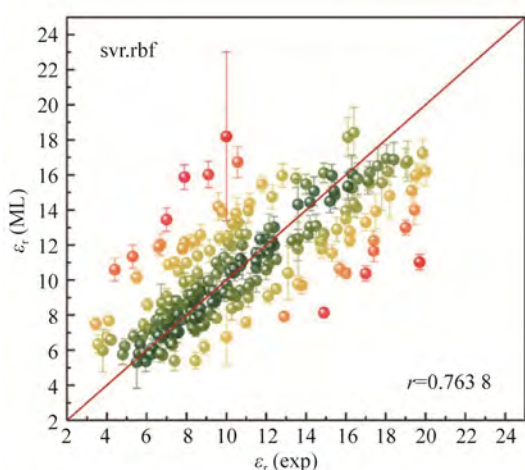
物钙钛矿的介电常数, 并建立了 1 208 个维度的描述符系统, 包括结合能、体积模量等。研究对象 ABO_3 包含 30 种不同的化学组成, 其中 $A=Mg^{2+}$ 、 Ca^{2+} 、 Sr^{2+} 、 Ba^{2+} 、 Zn^{2+} ; $B=Ti^{4+}$ 、 Zr^{4+} 、 Hf^{4+} 、 Si^{4+} 、 Ge^{4+} 、 Sn^{4+} , 同时涉及 $Pm3m$ 等 12 种空间群。采用偏最小二乘(PLS)回归方法建立机器学习模型, 并分析了介电性能与特征量之间的关系。类似地, Kim 等^[44]也针对钙钛矿 ABO_3 型材料结合第一性原理计算和机器学习, 建立了电子和离子介电常数机器学习模型。对比 18 种机器学习回归模型的表现, 优选出 LightGBM 模型用于后续建模和讨论。结果发现, 总数据集中随机抽取 80% 数据作为训练集, 剩余 20% 作为测试集, 模型预测能力最优(电子介电常数预测 $R^2=0.79$, 离子介电常数预测 $R^2=0.67$)。

上述工作中, 特征量大多通过通用的程序获得,

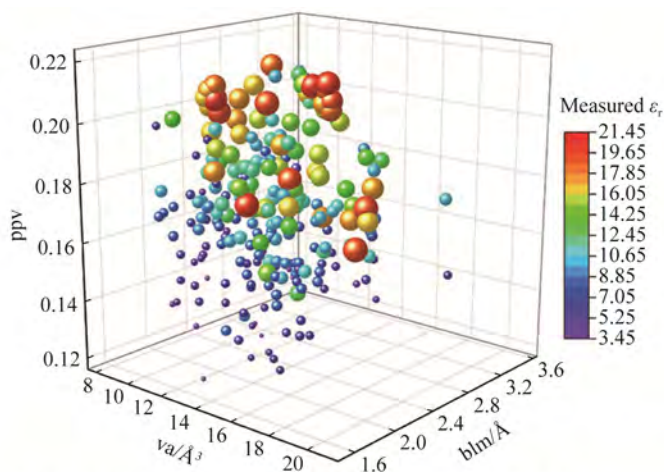
往往对目标针对性较弱且维度较高。高维特征量建模的计算成本较高, 同时不利于解决小数据问题, 模型解释性会变差。领域知识嵌入的特征量选取能够克服上述问题^[17, 45–47]。Qin 等^[32]为研制面向 5G 高频高速通信应用的低介电常数微波介质陶瓷, 从文献中收集了 254 种单相陶瓷的微波介电常数, 均为 Hakki–Coleman 法实验测试值。依据 Clausius–Mossotti (C–M) 方程、Penn 模型、P–V–L 理论等领域知识, 选取了 32 种与介电常数存在潜在关联的特征量, 经数据降维, 最终筛选出 7 个去相关的关键特征量。建模采用了 Gauss 核支持向量机(svr.rbf)等 5 种机器学习算法, 模型超参数寻优采取网格搜索法和十折交叉验证。综合考虑模型表现、特征量数目和材料科学知识, 从 635 个模型中选出最优模型, 如图 3a 所示。最优模型基于 svr.rbf, 包含单位体积 Shannon

介电极化率(ppv), 平均键长(blm)和单位原子所占的晶胞体积(va) 3 个决定性特征量。介电极化率是衡量微观介电响应大小的参数, 符合模型发现 ppv 对预测介电常数起决定性作用。此外, 低 blm, 伴随着高键强和键能, 弱化阳离子多面体中的颤振效应和离子位移极化; 增大 va 意味着提高晶体内自由体积占比, 利于稀释偶极子浓度和降低偶极子之间的

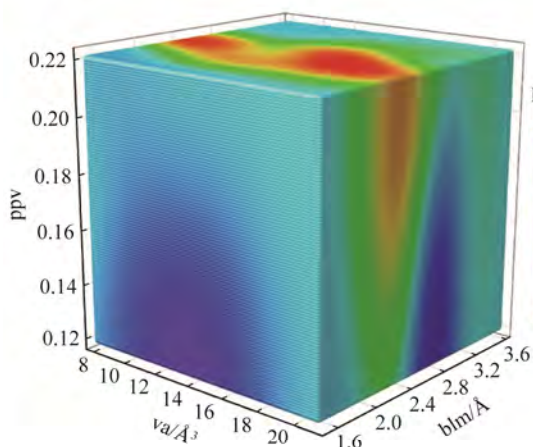
相互作用, 因此皆能降低介电常数。分析表明, 由弱极化率离子构成(低 ppv)、多面体结构单元紧凑(低 blm)且结构空旷(高 va)的材料往往很可能是低介电体系。图 3b~图 3d 为介电常数在特征量空间中的分布情况, 结果反映 ppv 正是介电常数预测模型的最重要特征量, 同时该特征量也属于 C-M 方程中的变量, 表明机器学习结果与理论方程相吻合。



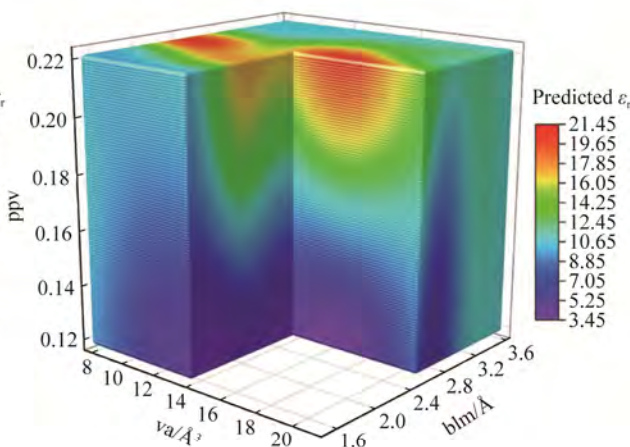
(a) ML predicted values and measured values of relative permittivities



(b) Distributions of measured relative permittivities in the features space



(c) Distributions of ML predicted relative permittivities in the features space



(d) A cross-section of Fig. 3(c)

图 3 介电常数机器学习预测值与实验值^[32]

Fig. 3 ML predicted and measured values of permittivities^[32]

同样基于介电常数的实验值, Kireeva 等^[48]针对白钨矿等 7 种常见结构的微波介质陶瓷, 利用机器学习方法分析了成分、工艺条件和晶体结构等参数对介电性能的影响。成分特征量即 A/B/C 位点阳离子种类及掺杂元素含量, 原子特征量包括极化率、Shannon 离子半径、电负性、有效价态和 *d* 轨道电子数等; 工艺条件主要指的是粉体煅烧温度和时间、陶瓷块体烧结温度、保温时间和升降温速率; 晶体

结构基于共同近邻分析(CNA)方法, 综合分子结构单元的对称性、连接度等信息计算 Pauling 数(PN), 以表征结构无序化倾向。结果表明, 对于不同结构, 对介电常数贡献较大的特征量不完全一致, 但 PN 是共同的决定性特征量, 反映结构无序度对介电常数存在关键性影响。最后, 该模型用于新结构材料的介电常数预测, 发现模型对锆石、尖晶石和岩盐结构材料具有良好的拓展性, 论证所发现规律的普

遍性。

在确定材料体系的前提下,优化材料配方、工艺条件等参数的机器学习模型更具有实用价值。Liu 等^[49]为快速开发低介电常数和低介电损耗的新型玻璃陶瓷及玻璃/陶瓷复合基低温共烧陶瓷(LTCC)材料,引入玻璃类型及含量、填料含量、煅烧温度及时间等工艺参数建立了 LTCC 材料介电性能机器学习预测模型。初始数据集包含 116 组 LTCC 实验数据,每组数据包含目标量介电常数、介电损耗、成分和工艺特征量;成分特征量即陶瓷填料、玻璃等成分类型与含量;工艺特征量即 3 阶段煅烧温度和保温时间。由于初始数据集存在数据不平衡的现象,直接用于建模获得的模型表现较差。因此,研究者采用主成分分析(PCA)和 k 均值方法对数据进行了聚类分析和降维。通过降维和特征工程,最终建模特征量包含:陶瓷填料 Al_2O_3 、玻璃陶瓷 $\text{Mg}_2\text{Al}_4\text{Si}_5\text{O}_{18}$ 、 $\text{MgO}-\text{Al}_2\text{O}_3-\text{SiO}_2$ 玻璃(MASG)、高硅 $\text{CaO}-\text{B}_2\text{O}_3-\text{SiO}_2$ (CBSG-S)、高硼 $\text{CaO}-\text{B}_2\text{O}_3-\text{SiO}_2$ (CBSG-B)、 $\text{B}_2\text{O}_3-\text{SiO}_2$ 玻璃(BG)和添加剂 $\text{MgO}-\text{Al}_2\text{O}_3-\text{SiO}_2$ 陶瓷(MAS)7 种成分特征量,以及工艺特征量第 2、3 阶段的煅烧反应积。研究发现,高硅 $\text{CaO}-\text{B}_2\text{O}_3-\text{SiO}_2$ (CBSG-S)玻璃介电常数和介电损耗都较低,因此选择该体系为研究对象,固定其他特征量,只改变 CBSG-S、 Al_2O_3 、 $\text{Mg}_2\text{Al}_4\text{Si}_5\text{O}_{18}$ 含量进行材料性能预测。如图 4 所示,红色区域预估能同时满足介电常数 $\epsilon_r < 10$ 和介电损耗 $\tan\delta < 2 \times 10^{-3}$ 性能目标。该工作探讨了机器学习方法在介质材料双参数优化的可行性,未来有望将其拓展至更多目

标性能的同时优化,为新型 LTCC 材料成分设计、工艺调控提供参考。

2.2 品质因数与介电损耗

品质因数($Q \times f$)值尚无成熟可靠的理论计算方法,而传统计算公式需要参数较多且获取困难,故 $Q \times f$ 值一般只通过实验测试得到。对于陶瓷样品,由于存在气孔、杂质离子等缺陷,而这些缺陷在不同频率下对介电损耗($\tan\delta$)的影响不尽相同,因此 $Q \times f$ 值通常不是常数。正是由于 $Q \times f$ 值对材料显微形貌敏感,不同研究者报道相同材料的 $Q \times f$ 值经常有较大出入。若从不同文献中收集 $Q \times f$ 值数据用于机器学习建模,模型结果不太可靠。因此,目前采用数据驱动方法研究微波介质陶瓷 $Q \times f$ 值或 $\tan\delta$ 相关文献较少。

尽管如此,有研究者针对特定材料体系,基于自行合成的样品及测试数据,初步探讨了 $Q \times f$ 值机器学习模型研究的可行性。Qin 等^[50]采用 A 位阳离子置换方法,研究 $(\text{Ca}_x\text{Sr}_{1-x})\text{CuSi}_4\text{O}_{10}$ 成分、结构和介电性能之间的关系。结果发现 Ca^{2+} 取代 A 位的 Sr^{2+} 会引起 $[(\text{Ca},\text{Sr})\text{O}_8]$ 十二面体单元发生显著的收缩和畸变,而硅铜双层骨架结构几乎没有变化。伴随着局域结构的变化,材料的 $Q \times f$ 值显著降低,即从 48 794 GHz 几乎单调下降至 20 391 GHz (@~13.5 GHz)。所有样品由相同原料、工艺、设备和实验员制备,环境条件受到严格控制。据此,研究者近似认为 $Q \times f$ 值变化来源于 $[(\text{Ca},\text{Sr})\text{O}_8]$ 十二面体的变化,其他因素视为微扰项。通过键长、键价等 8 个特征量描述 $[(\text{Ca},\text{Sr})\text{O}_8]$ 十二面体局域结构,经过降维保留 5 个特征量。穷举 5 个特征量的所有组合,获得 31 个数据子集,皆用于机器学习建模。建模采用 Gauss 核支持向量机算法,模型超参数优化采用网格搜索法和留一法。最优模型表现良好($R^2=0.933\ 1$),包含 A—O2 键的键长(b/l_2)和 A—O 键的键长方差 2 个特征量。最后,模型预测了文献已报道结构参数、但未知性能的 $(\text{Ba}_y\text{Sr}_{1-y})\text{CuSi}_4\text{O}_{10}$ 陶瓷的 $Q \times f$ 值,实验验证了模型可拓展至含其他元素的硅铁钛矿型结构陶瓷,如图 5 所示。

Qin 等^[50]建立的 $Q \times f$ 值预测模型仅针对特定结构材料有效,无法拓展至不同结构的材料,因此存在很大的局限性。通过理论分析可知,本征介电损耗起源于晶格非简谐振动,例如三量子过程、四量子过程等因素。双声子态密度(TDOS)表示最低阶近似中声子散射的过程数,其大小取决于声子寿命。而声子寿命是本征介电损耗的起源之一,故 TDOS

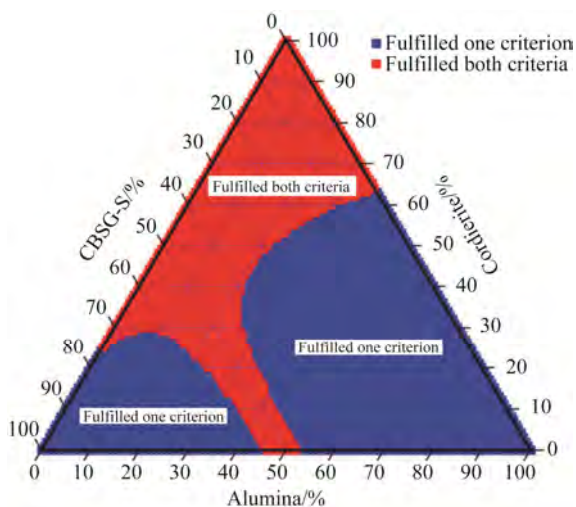


图 4 CBSG-S- $\text{Mg}_2\text{Al}_4\text{Si}_5\text{O}_{18}$ - Al_2O_3 LTCC 材料的性能分布^[49]
Fig. 4 Property contour plot of LTCCs composed of CBSG-S, cordierite, and alumina^[49]

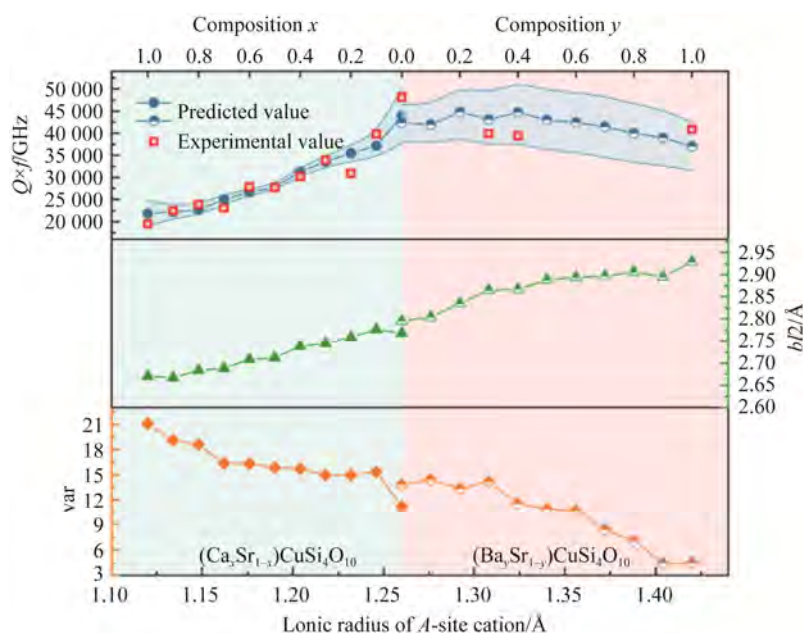


图 5 $Q \times f$ 机器学习模型的预测结果^[50]
Fig. 5 Results of the ML model for $Q \times f$ values prediction^[50]

与 $\tan\delta$ 存在密切关系。Oba 等^[51]为降低本征 $\tan\delta$ 的计算成本, 基于 TDOS 多层感知器模型, 利用迁移学习方法建立本征 $\tan\delta$ 预测模型。TDOS 模型在预测集中 R^2 高达 0.828。另外, 考虑到计算成本, 研究者只选取了 50 种二元和三元的绝缘材料进行 100 GHz 频段下本征 $\tan\delta$ 计算。本征 $\tan\delta$ 计算结合了晶格振动与外加电场的线性响应公式、DFPT、第一性原理分子动力学等计算方法。本征 $\tan\delta$ 的预测采用了 2 种建模策略: 从头构建和迁移学习模型, 后者结合了原始特征量和预训练的 TDOS 数据。结果显示, 迁移学习模型均方误差比从头建模低 25%, 尤其是外推能力得到显著提升。然而, 该研究仅停留在理论计算, 尚未开展实验验证其可靠性, 也未提炼出指导材料开发的新知识。

除此之外, 铁电陶瓷领域已报道机器学习介电损耗预测模型, 值得微波介质陶瓷领域借鉴。Xu 等^[52]为快速发现高性能钙钛矿 ABO_3 型铁电陶瓷, 采用“确定独立筛选和稀疏算子”(SISSO)方法建立了 $\tan\delta$ 等性能的预测模型, 发现 $\tan\delta$ 与 $(H_B/Z_b)/(\alpha O_3 + H_A)$ 存在高度相关性, 其中: αO_3 为点阵常数边长; H_A 为熔融时 A 位原子熔化焓; H_B 为熔融时 B 位原子熔化焓; Z_b 为 B 位原子电负性。该工作揭示了晶体点阵常数边长越长, A 和 B 位原子熔化焓之比越大, B 位原子电负性越大, 越利于获得低损耗钙钛矿材料。

2.3 谐振频率温度系数

相比于介电常数和 $Q \times f$ 值, 谐振频率温度系数

τ_f 值的机器学习模型研究更少。上述 2.1 节提到的 Kireeva 工作^[48]中, 除了分析了 7 种常见结构的微波介质陶瓷的成分、工艺、晶体结构与介电常数关系, 还探讨了 τ_f 值的影响因素。模型结果显示, 相比介电常数, 影响谐振频率温度系数的因素更复杂。除了结构和成分因素, 建模涉及的所有工艺参数(预烧、烧结的温度和时间)都对 τ_f 值的预测影响显著, 这是因为热处理过程与样品缺陷浓度、晶界状态、第二相、成分偏析等因素有关, 都影响着 τ_f 值。

由此可见, 数据驱动方法在 $Q \times f$ 和 τ_f 值研究中尚处于初步阶段, 这是由于 $Q \times f$ 和 τ_f 值对非本征因素较为敏感。然而, 对于陶瓷材料, 快速获取诸如显微形貌、缺陷类型与浓度等因素的定量化数据方法并不成熟。目前, 研究者倾向于避免直接克服该问题, 转而采用工艺参数间接地反映材料的非本征因素。若想进一步提升模型准确性和普适性, 并评价具体每种非本征因素对性能的影响程度, 从而指导材料制备工艺的调控, 就无法绕过非本征因素定量化这一问题。所幸的是, 已有研究者采用图像识别和数理统计的方法定量描述显微形貌^[53]; 缺陷类型和浓度则可以通过分子动力学模拟和 TSDC、XAFS 等实验手段定量化^[54-56]。结合高通量方法, 有望积累足够多且准确的非本征因素数据, 以优化 $Q \times f$ 和 τ_f 值的模型研究。

此外, 热力学等性能参数也影响着微波介质陶瓷及器件的服役状况, 但数据驱动方法在相关研究中关注度较低。不过在其他无机材料领域中, 例如

建筑玻璃、环境障涂层、超高温陶瓷, 已有研究者引入机器学习方法对热膨胀系数^[57–58]、热导率^[59]、熔点^[60–61]等热力学参数进行建模分析和预测, 未来有望将相关成果拓展至微波介质陶瓷的研究中。

3 微波器件设计优化

微波介质陶瓷主要应用于微波天线、滤波器、谐振器、双工器、振荡器、移相器、微波基板等器件的研制。天线和滤波器的关注度最高。数据驱动方法辅助天线和滤波器设计的研究已经取得了系列进展。

3.1 天线

天线是一种电磁换能器, 实现传输线上的导波和自由空间波之间的相互转换, 在无线电系统中起到接收和发射电磁信号的作用。5G 天线设计不再只是分立的单元的尺寸参数优化, 同时还需兼顾阵列单元之间连接关系和超材料结构等设计, 使得天线设计任务变得非常复杂, 提高了计算成本^[62–65]。近年来, 机器学习方法已广泛应用于天线设计中, 实现降本增效的作用。

Sharma 等^[66]基于 Kuo 等^[67]设计的一款 2.4–3.0 GHz 和 5.15–5.6 GHz 双工作频段的双 T 型单极子天线, 采用了机器学习方法对其天线尺寸参数进行了优化。研究者定义了双频天线的设计优值(FOM), 即在 2.40–3.00 GHz 和 5.15–5.60 GHz 频率范围内每个频率点对应的 S_{11} 绝对值之和, 表达为

$$\text{FOM} = \sum_{f=2.4}^{f=3.0} |S_{11}(f)| + \sum_{f=5.15}^{f=5.6} |S_{11}(f)|$$

机器学习模型以 FOM 为目标量, 特征量为 5 个尺寸参数(l_{21} , l_{22} , w_1 , w_2 , w), 如图 6 所示。设定特征量的搜索范围和步长, 总共有 2 126 696 种尺寸参数组合。逐一通过 ANSYS HFSS 电磁仿真软件计算 FOM 值成本极高, 因此通过随机抽样的方法从中选择了 450 种不同的设计, 预先计算出 FOM 值构成机器学习数据集。采用 3 种机器学习算法, 包括最小绝对收缩和选择算子(lasso), 人工神经网络(ANN)和 k-最近邻算法(kNN)进行建模。ANN 和 lasso 模型都获得较准确的预测结果, 可用于新尺寸参数组合的天线 FOM 预测。优选的尺寸参数组合经过 HFSS 仿真结果的验证。相比原工作采用“经验试错法”优化的结果, 机器学习方法获得更高的 FOM 值, 尤其是在 5.15–5.60 GHz 频段内 $|S_{11}|$ 比原值高出不止 1 倍。由此可见, 机器学习方法不仅能提高天线尺

寸优化效率, 使仿真计算更有效、更具针对性, 还能发现更优的设计。

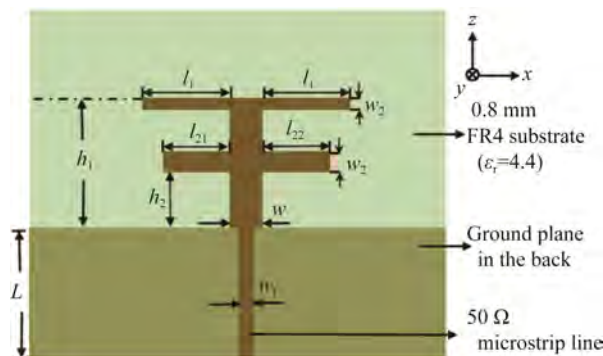


图 6 双频双 T 型单极天线设计示意图^[66]

Fig. 6 Geometric diagram of the dual-band double-T monopole antenna^[66]

机器学习方法除了在上述 Sub-6G 双频双 T 型单极子天线的设计优化中取得优良成效, 还被证实 5.8 GHz 频段 10 级对称串联馈电微带天线阵列^[68], 6 GHz 频率工作的选择表面单极子天线^[69], 26.5–27.5 GHz 毫米波频段八木天线^[70], 43.5 GHz 毫米波频段 SIW 背腔缝隙天线^[71], 77 GHz 车联网用贴片天线阵列^[72]等更多不同频段、不同类型的天线或天线阵列的设计中皆具有可靠性。此外, 机器学习辅助基于远场诊断^[73]和近场诊断模拟^[74]的天线阵列故障单元判断和定位, 阵列单元之间的互耦补偿计算^[75]等方面也皆取得进展。

3.2 滤波器

滤波器是 5G 通信用介陶瓷的另一个重要应用^[76]。滤波器设计的正向模型指的是输入结构参数, 计算滤波器性能的模型。神经网络方法已被应用于带通滤波器(BPF)的性能预测中。然而, 正向模型无法实现尺寸调参, 因此还需要引入深度 Q 网络(DQN)进行参数优化。DQN 是一种强化学习方法, 在腔体 BPF 优化中已有应用。Ohira 等^[77]引入 2 步神经网络模型, 即正向模型通过横向耦合矩阵计算谐振器之间的所有交叉耦合效应, 反向模型输入横向耦合矩阵自动生成滤波器的初始结构参数。DQN 根据输入的结构参数, 反馈结构优化动作, 即上调/下调某个结构参数。优化模型框架如图 7 所示。利用该框架, 仅 3 h 历经 30 000 次迭代, 就优化设计了一款 5 阶微带 BPF。若不采用正向神经网络模型, 达到相同效果预计需要 625 d。

Wu 等^[78]将模糊算法应用于 3 阶 LTCC 微波带通滤波器的设计中。第 1 步是低精度的快速电磁仿

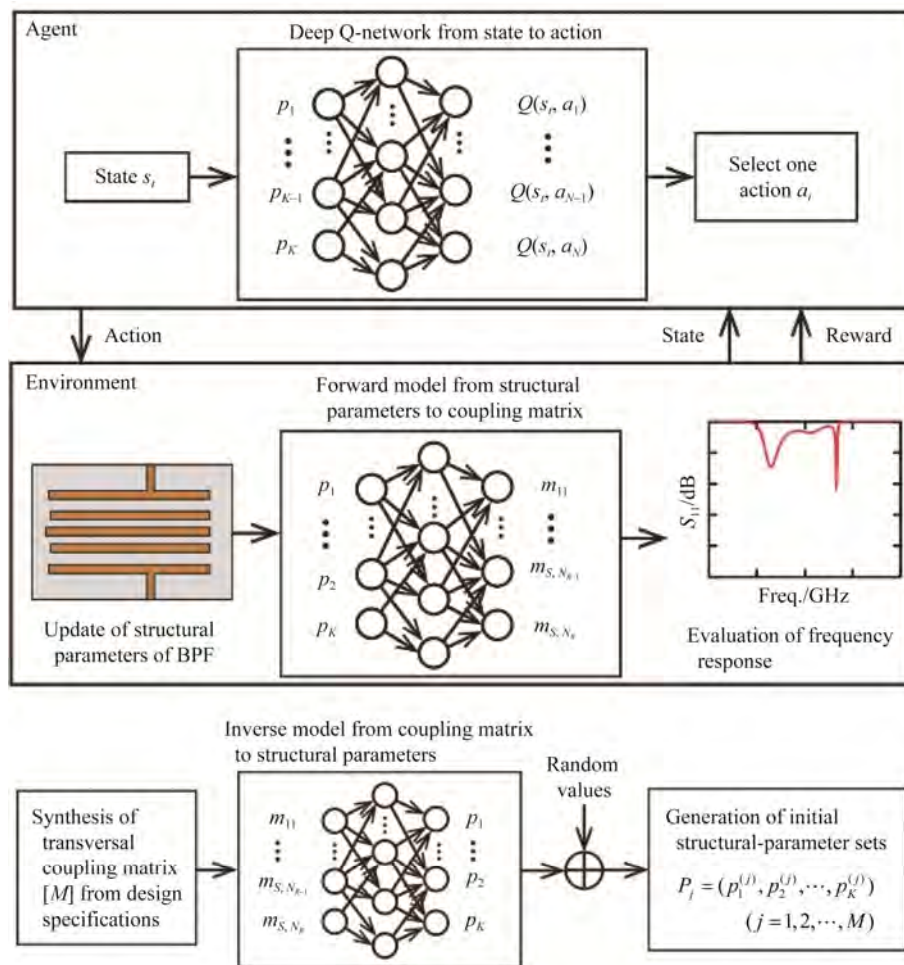


图 7 使用 DQN 和前向模型提出的 BPF 自动结构调整框架, 以及使用逆模型自动生成初始结构参数集^[77]

Fig. 7 Framework of the proposed BPF automatic structural adjustment using DQN and forward model. Automatic generation of initial structural-parameter sets using inverse model^[77]

真; 第 2 步则是基于低精度仿真结果, 采用模糊算法优化滤波器结构参数。为了验证优化结果, 采用 LTCC 工艺制备了优化设计的滤波器。优化滤波器响应的仿真结果与实测结果相吻合, 证实了模糊算法优化 LTCC 滤波器的可行性。

基片集成波导(SIW)滤波器具有传统矩形金属波导相似的场分布和传输特性, 可用于设计各种波导型器件, 如天线、滤波器和功率分配器。一般而言, SIW 滤波器的电磁场全波仿真与优化耗时长, 但可以通过神经网络算法降低计算量。对于复杂结构 SIW 滤波器的设计, 每增加 1 个设计变量, 建立精确的神经网络模型所需要的训练数据量将呈接近指数形式增长。Du 等^[79]提出了 1 种新型校准粗略模型神经网络, 只需要几百个训练数据就能设计出非常接近理想响应的多参数 5 阶 H 平面 SIW 滤波器。此外, Sun 等^[80]采用卷积神经网络(CNN)提取模拟响应的耦合矩阵, 加速 SIW 滤波器调谐过程。

Rezaee 等^[81]基于主动学习方法发现方形开环谐振器(SOLRs)滤波器的 3 个重要参数(谐振器之间的间距、谐振器长度和衬底介电常数)与耦合因数和外部品质因数的关系, 并以此为依据设计并制备了 2 款 4 极 Chebychev 带通滤波器。Jamshidi 等^[82]基于 Bayesian 正则化反向传播(BRBP)学习算法, 建立动态神经网络模型, 设计了 1 款微带低通滤波器(LPF)。与传统方法设计的同类型滤波器相比, BRBP 模型辅助设计的 LPF 具有更高的品质因数、更优良的滚降等特性。

4 展望

5G/6G 通信应用的介质陶瓷及器件的数据驱动研究方兴未艾, 未来需要在材料数据生产平台、多目标性能优化、微波器件服役特性等方面加大研究投入力度。

1) 高通量标准化的材料数据生产平台的建立。

数据驱动材料学研究的基本要素是数据。建立通用的、考虑更多参数(温度、频率等)的机器学习模型,要求数据量尽可能大,数据质量尽可能高。高通量计算和实验方法实现材料数据快速且并行地产生,已成为数据驱动研究的基础设施。微波介质陶瓷样品高通量制备已经得到可行性验证,但微波介电性能的测试表征依旧采取 Hakki–Coleman 法逐个样品单频率测试^[83]。此外, Hakki–Coleman 法并不适用于变温变频的多参数介电性能表征,同时难以将测试频率提升至毫米波频段。或许在不久的将来,微波/毫米波介质材料研究实验室将迎来一次设备的革新。

2) 复合介质材料介电性能预测模型的研究。5G/6G 低时延通信要求介质材料具备超低介电常数。然而,“超低介电常数”这一概念并无统一定义。有研究者认为 $\epsilon_r < 6$ 即属于超低介电常数范畴,也有的把标准降至 5.0 或 4.5,甚至以熔融石英($\epsilon_r \approx 3.8$)为分界^[84–87]。能满足超低介电常数的陶瓷体系并不多,因此研究者逐渐把目光转移向有机–无机复合材料和多孔材料^[88–90]。复合材料的性能受到化学组成、物相比例及分布、复合类型、界面等因素的影响。目前,复合材料并无通用的介电性能计算模型,留给机器学习模型研究广阔的空间。

3) 机器学习辅助多目标性能优化策略的选择。3 大介电性能之间并非完全独立,甚至还存在权衡关系,这就对介质陶瓷的多目标性能优化提出了挑战。例如,同样通过离子掺杂的方法调控性能,对于某些结构的材料 $Q \times f$ 和 τ_f 值呈负相关变化^[50],但另外一些则呈正相关变化^[91]。除此之外,介电损耗 $\tan \delta$ 对显微形貌和缺陷较为敏感,而 ϵ_r 受其影响却往往不显著。介电性能的影响因素繁多,因此性能调控可以从成分、结构和工艺等多方面着手,但每种手段对不同性能的调控效果一般是不同的。传统的试错法优化材料缺乏整体观,而机器学习模型有望厘清性能之间的关联,并辅助人类发现和选择多目标性能优化的策略,实现多种性能同时优化。

4) 多目标性能优化模型催生新原理。针对某一性能,机器学习模型如果能给出不同的优化策略,那么背后对应的物理机制很可能也是不同的。换言之,机器学习多目标优化模型有望指导人类发现新知识。以金属材料强化手段为例,在位错理论建立之前,人类已经懂得通过塑性加工和细化晶粒提升材料强度。前者在提升材料强度的同时会使韧性降低,而后者则会提升韧性,这是因为背后的强化机

制不同。正是因为不同现象和规律的发现,才会驱使人类提出新理论解释。在未来的微波介质陶瓷研究中,机器学习模型将充当发现新规律的角色,也可能会驱使人类提出新的电介质理论。

5) 微波器件服役性能动态纠正模型延长器件寿命。数据驱动方法在微波器件研究中,目前最受关注的主题是器件高效设计,而有关微波器件服役过程的研究相对较少。微波器件达到一定服役时间,材料可能会发生老化,因此介电性能会偏离初始值,但此时材料尚未彻底失效。若直接更换器件,会造成资源浪费;若继续使用,器件输出信号则会偏离预期。综合器件结构、服役环境与时长、材料属性等因素,利用机器学习模型自动纠正偏离预期的信号,从而延长器件实际寿命。

参考文献:

- [1] AGRAWAL A, CHOUDHARY A. Perspective: Materials informatics and big data: Realization of the “fourth paradigm” of science in materials science[J]. *APL Mater*, 2016, 4(5): 053208.
- [2] 施思齐, 徐积维, 崔艳华, 等. 多尺度材料计算方法[J]. *科技导报*, 2015, 33(10): 20–30.
SHI Siqi, XU Jiwei, CUI Yanhua, et al. *Sci Technol Rev (in Chinese)*, 2015, 33(10): 20–30.
- [3] DERINGER V L, BERNSTEIN N, CSÁNYI G, et al. Origins of structural and electronic transitions in disordered silicon[J]. *Nature*, 2021, 589(7840): 59–64.
- [4] BAEK M, DIMAIO F, ANISHCHENKO I, et al. Accurate prediction of protein structures and interactions using a three-track neural network[J]. *Science*, 2021, 373(6557): 871–876.
- [5] RACCUGLIA P, ELBERT K C, ADLER P D F, et al. Machine-learning-assisted materials discovery using failed experiments[J]. *Nature*, 2016, 533(7601): 73–76.
- [6] RAJAN K. Materials informatics: The materials “gene” and big data[J]. *Annu Rev Mater Res*, 2015, 45(1): 153–169.
- [7] RICKMAN J M, LOOKMAN T, KALININ S V. Materials informatics: From the atomic-level to the continuum[J]. *Acta Mater*, 2019, 168: 473–510.
- [8] SENDEROWITZ H, TROPSHA A. Materials informatics[J]. *J Chem Inf Model*, 2018, 58(7): 1313–1314.
- [9] KIM C, PILANIA G, RAMPRASAD R. From organized high-throughput data to phenomenological theory using machine learning: The example of dielectric breakdown[J]. *Chem Mater*, 2016, 28(5): 1304–1311.
- [10] YUAN R, XUE D, XU Y, et al. Machine learning combined with feature engineering to search for BaTiO₃ based ceramics with large piezoelectric constant[J]. *J Alloys Compd*, 2022, 908: 164468.
- [11] GONG J, CHU S, MEHTA R K, et al. XGBoost model for electrocaloric temperature change prediction in ceramics[J]. *npj Comput Mater*, 2022, 8(1): 140.
- [12] HE J, LI J, LIU C, et al. Machine learning identified materials descriptors for ferroelectricity[J]. *Acta Mater*, 2021, 209: 116815.
- [13] 张高群, 汪宏. 超低温烧结微波介质陶瓷研究进展[J]. *硅酸盐学报*,

- 2017, 45(9): 1256–1264.
- ZHANG Gaoqun, WANG Hong. J Chin Ceram Soc, 2017, 45(9): 1256–1264.
- [14] YANG H, ZHANG S, YANG H, et al. The latest process and challenges of microwave dielectric ceramics based on pseudo phase diagrams[J]. J Adv Ceram, 2021, 10(5): 885–932.
- [15] GRASSO S, BIESUZ M, ZOLI L, et al. A review of cold sintering processes[J]. Adv Appl Ceram, 2020, 119(3): 115–143.
- [16] SEBASTIAN M T, WANG H, JANTUNEN H. Low temperature co-fired ceramics with ultra-low sintering temperature: A review[J]. Curr Opin Solid State Mater Sci, 2016, 20(3): 151–170.
- [17] 刘悦, 邹欣欣, 杨正伟, 等. 材料领域知识嵌入的机器学习[J]. 硅酸盐学报, 2022, 50(3): 863–876.
- LIU Yue, ZOU Xinxin, YANG Zhengwei, et al. J Chin Ceram Soc, 2022, 50(3): 863–876.
- [18] JOSE R, RAMAKRISHNA S. Materials 4.0: Materials big data enabled materials discovery[J]. Appl Mater Today, 2018, 10: 127–132.
- [19] RAJAN K. Materials informatics[J]. Mater Today, 2005, 8(10): 38–45.
- [20] 牛程程, 李少波, 胡建军, 等. 机器学习在材料信息学中的应用综述[J]. 材料导报, 2020, 34(23): 23100–23108.
- NIU Chengcheng, LI Shaobo, HU Jianjun, et al. Sci Technol Rev (in Chinese), 2020, 34(23): 23100–23108.
- [21] LIU Y, ZHAO T, JU W, et al. Materials discovery and design using machine learning[J]. J Materiomics, 2017, 3(3): 159–177.
- [22] JAIN A, ONG S P, HAUTIER G, et al. Commentary: The materials project: A materials genome approach to accelerating materials innovation[J]. APL Mater, 2013, 1(1): 011002.
- [23] SAAL J E, KIRKLIN S, AYKOL M, et al. Materials design and discovery with high-throughput density functional theory: The open quantum materials database (OQMD)[J]. JOM, 2013, 65(11): 1501–1509.
- [24] CURTAROLO S, SETYAWAN W, HART G L W, et al. Aflow: An automatic framework for high-throughput materials discovery[J]. Comput Mater Sci, 2012, 58: 218–226.
- [25] SMITH A, BHAT V, AI Q, et al. Challenges in information-mining the materials literature: A case study and perspective[J]. Chem Mater, 2022, 34(11): 4821–4827.
- [26] COURT C J, COLE J M. Magnetic and superconducting phase diagrams and transition temperatures predicted using text mining and machine learning[J]. npj Comput Mater, 2020, 6(1): 1–9.
- [27] HUANG E W, LEE W J, SINGH S S, et al. Machine-learning and high-throughput studies for high-entropy materials[J]. Mat Sci Eng R, 2022, 147: 100645.
- [28] LANGNER S, HÄSE F, PEREA J D, et al. Beyond ternary OPV: High-throughput experimentation and self-driving laboratories optimize multicomponent systems[J]. Adv Mater, 2020, 32(14): 1907801.
- [29] PFEIFER E A, KROENLEIN K. Perspective: Data infrastructure for high throughput materials discovery[J]. APL Mater, 2016, 4(5): 053203.
- [30] HU Y-J, ZHAO G, ZHANG M, et al. Predicting densities and elastic moduli of SiO₂-based glasses by machine learning[J]. npj Comput Mater, 2020, 6(1): 1–13.
- [31] TAKAHASHI A, KUMAGAI Y, MIYAMOTO J, et al. Machine learning models for predicting the dielectric constants of oxides based on high-throughput first-principles calculations[J]. Phys Rev Mater, 2020, 4(10): 103801.
- [32] QIN J, LIU Z, MA M, et al. Machine learning approaches for permittivity prediction and rational design of microwave dielectric ceramics[J]. J Materiomics, 2021, 7(6): 1284–1293.
- [33] LIANG Y, MA M, ZHANG F, et al. Wireless microfluidic sensor for metal ion detection in water[J]. ACS Omega, 2021, 6(13): 9302–9309.
- [34] MOLOKKEEV M S, SU B, ALEKSANDROVSKY A S, et al. Machine learning analysis and discovery of zero-dimensional ns² metal halides toward enhanced photoluminescence quantum yield[J]. Chem Mater, 2022, 34(2): 537–546.
- [35] WARD L, AGRAWAL A, CHOUDHARY A, et al. A general-purpose machine learning framework for predicting properties of inorganic materials[J]. npj Comput Mater, 2016, 2(1): 16028.
- [36] MEFTAH N, KLYMENKO M, CHRISTOFFERSON A J, et al. Machine learning property prediction for organic photovoltaic devices[J]. npj Comput Mater, 2020, 6(1): 1–8.
- [37] 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]. J Phys Mater, 2019, 2(3): 032001.
- [38] WANG Z, SUN Z, YIN H, et al. Data-driven materials innovation and applications[J]. Adv Mater, 2022, 34(36): 2104113.
- [39] SCOTT D J, COVENEY P V, KILNER J A, et al. Prediction of the functional properties of ceramic materials from composition using artificial neural networks[J]. J Eur Ceram Soc, 2007, 27(16): 4425–4435.
- [40] SCOTT D J, MANOS S, COVENEY P V, et al. Functional ceramic materials database: An online resource for materials research[J]. J Chem Inf Model, 2008, 48(2): 449–455.
- [41] SCOTT D J, MANOS S, COVENEY P V. Design of electroceramic materials using artificial neural networks and multiobjective evolutionary algorithms[J]. J Chem Inf Model, 2008, 48(2): 262–273.
- [42] MORITA K, DAVIES D W, BUTLER K T, et al. Modeling the dielectric constants of crystals using machine learning[J]. J Chem Phys, 2020, 153(2): 024503.
- [43] NODA Y, OTAKE M, NAKAYAMA M. Descriptors for dielectric constants of perovskite-type oxides by materials informatics with first-principles density functional theory[J]. Sci Technol Adv Mater, 2020, 21(1): 92–99.
- [44] KIM E, KIM J, MIN K. Prediction of dielectric constants of ABO₃-type perovskites using machine learning and first-principles calculations[J]. Phys Chem Chem Phys, 2022, 24(11): 7050–7059.
- [45] MURDOCK R J, KAUWE S K, WANG A Y T, et al. Is domain knowledge necessary for machine learning materials properties?[J]. Integr Mater Manuf I, 2020, 9(3): 221–227.
- [46] CHILDS C M, WASHBURN N R. Embedding domain knowledge for machine learning of complex material systems[J]. MRS Commun, 2019, 9(3): 806–820.
- [47] YUAN R, LIU Z, BALACHANDRAN P V, et al. Accelerated discovery of large electrostrains in BaTiO₃-based piezoelectrics using active learning[J]. Adv Mater, 2018, 30(7): 1702884.
- [48] KIREEVA N, SOLOV'EV V P. Machine learning analysis of microwave dielectric properties for seven structure types: The role of the processing and composition[J]. J Phys Chem Solids, 2021, 156: 110178.
- [49] LIU Y C, LIU T Y, HUANG T H, et al. Exploring dielectric constant and dissipation factor of LTCC using machine learning[J]. Materials, 2021, 14(19): 5784.

- [50] QIN J, LIU Z, MA M, et al. Structure and microwave dielectric properties of gillespite-type $\text{ACuSi}_4\text{O}_{10}$ ($A=\text{Ca}, \text{Sr}, \text{Ba}$) ceramics and quantitative prediction of the $Q \times f$ value via machine learning[J]. *ACS Appl Mater Interfaces*, 2021, 13(15): 17817–17826.
- [51] OBA Y, UMEDA Y, ISHII D. Materials informatics for dielectric loss tangent in the millimeter wave region[J]. *Jpn J Appl Phys*, 2022, 61: SN1007.
- [52] XU P, CHANG D, LU T, et al. Search for ABO_3 type ferroelectric perovskites with targeted multi-properties by machine learning strategies[J]. *J Chem Inf Model*, 2021, 62(21): A–L.
- [53] KIM H, HAN J, HAN T Y-J. Machine vision-driven automatic recognition of particle size and morphology in SEM images[J]. *Nanoscale*, 2020, 12(37): 19461–19469.
- [54] IBADAT S, YOUNAS M, SHAHZADA S, et al. Realistic dielectric response of high temperature sintered ZnO ceramic: A microscopic and spectroscopic approach[J]. *RSC Adv*, 2020, 10(51): 30451–30462.
- [55] ZHANG X, ZHANG L, ZHANG J, et al. Dielectric response and thermally stimulated depolarization current analysis of $\text{BaNd}_{1.76}\text{Bi}_{0.24}\text{Ti}_5\text{O}_{14}$ high-temperature microwave capacitors[J]. *J Mater Sci*, 2014, 50(3): 1141–1149.
- [56] LIU S, COHEN R E. Multiscale simulations of defect dipole-enhanced electromechanical coupling at dilute defect concentrations[J]. *Appl Phys Lett*, 2017, 111(8): 082903.
- [57] 张培新, 文岐业, 刘剑洪, 等. 矿渣微晶玻璃专家系统类比设计模型[J]. *硅酸盐学报*, 2004, 32(8): 1022–1028.
ZHANG Peixin, WEN Qiye, LIU Jianhong, et al. *J Chin Ceram Soc*, 2004, 32(8): 1022–1028.
- [58] PENG J, HARSHA GUNDA N S, BRIDGES C A, et al. A machine learning approach to predict thermal expansion of complex oxides[J]. *Comput Mater Sci*, 2022, 210: 111034.
- [59] WANG Z, HUANG S, WEN G, et al. Thermal conductivity prediction and structure-property relationship of $\text{CaO-SiO}_2\text{-Al}_2\text{O}_3$ ternary system: A combination of molecular dynamics simulations and machine learning[J]. *J Mol Liq*, 2021, 324(15): 114697.
- [60] HAN T, HUANG J, SANT G, et al. Predicting mechanical properties of ultrahigh temperature ceramics using machine learning[J]. *J Am Ceram Soc*, 2022, 105(11): 1–13.
- [61] QIN J, LIU Z, MA M, et al. Machine learning-assisted materials design and discovery of low-melting-point inorganic oxides for low-temperature cofired ceramic applications[J]. *ACS Sustainable Chem Eng*, 2022, 10(4): 1554–1564.
- [62] CHATAUT R, AKL R. Massive MIMO Systems for 5G and beyond Networks—Overview, Recent Trends, Challenges, and Future Research Direction[J]. *Sensors*, 2020, 20(10): 2753.
- [63] 尤肖虎, 潘志文, 高西奇, 等. 5G 移动通信发展趋势与若干关键技术[J]. *中国科学: 信息科学*, 2014, 44(5): 551–563.
YOU Xiaohu, PAN Zhiwen, GAO Xiqi, et al. *Sci Sin Inf (in Chinese)*, 2014, 44(5): 551–563.
- [64] 许冉, 韩波, 杜记航. 基于超材料的低互耦 MIMO 天线设计[J]. *阜阳师范大学学报(自然科学版)*, 2022, 39(2): 33–38.
XU Ran, HAN Bo, DU Jihang. *J Fuyang Norm Univ: Nat Sci (in Chinese)*, 2022, 39(2): 33–38.
- [65] LI L, ZHOU J. Metamaterial technology and its application prospects[J]. *Chin J Eng Sci*, 2018, 20(6): 69.
- [66] SHARMA Y, ZHANG H H, XIN H. Machine learning techniques for optimizing design of double T-shaped monopole antenna[J]. *IEEE T Antenn Propag*, 2020, 68(7): 5658–5663.
- [67] KUO Y L, WONG K L. Printed double-T monopole antenna for 2.4/5.2 GHz dual-band WLAN operations[J]. *IEEE T Antenn Propag*, 2003, 51(9): 2187–2192.
- [68] WU Q, CHEN W, YU C, et al. Multilayer machine learning-assisted optimization-based robust design and its applications to antennas and array[J]. *IEEE T Antenn Propag*, 2021, 69(9): 6052–6057.
- [69] NAKMOUCHE M F, ALLAM A M M A, FAWZY D E, et al. Development of a high gain FSS reflector backed monopole antenna using machine learning for 5G applications[J]. *Prog Electromagn Res M*, 2021, 105: 183–194.
- [70] JAFARIEH A, NOURI M, BEHROOZI H. Optimized 5G-MMW compact Yagi-Uda antenna based on machine learning methodology[C]//2021 29th Iranian Conference on Electrical Engineering (ICEE), Tehran, Islamic Republic of Iran, 2021: 751–756.
- [71] WU Q, WANG H, HONG W. Broadband millimeter-wave SIW cavity-backed slot antenna for 5G applications using machine-learning-assisted optimization method[C]//2019 International Workshop on Antenna Technology (iWAT), Miami, USA, 2019: 9–12.
- [72] KARUPPUSWAMI S, MONDAL S, CHAHAL P. Design optimization of a 77 GHz antenna array using machine learning[C]//2021 IEEE 71st Electronic Components and Technology Conference (ECTC), San Diego, USA, 2021: 1199–1204.
- [73] DE LANGE L, LUDICK D J. Application of machine learning for antenna array failure analysis[C]//2018 International Workshop on Computing, Electromagnetics, and Machine Intelligence (CEMi), Stellenbosch, South Africa, 2019: 5–6.
- [74] LIM H J, LEE D H, PARK H B, et al. Near-field-based 5G Sub-6 GHz array antenna diagnosis using transfer learning[J]. *Appl Sci*, 2021, 11(21): 10164.
- [75] ALZAHED A M, ANTAR Y M M, MIKKI S. Design of neural-network-based mutual coupling compensators for printed planar antenna arrays[C]//2020 IEEE International Symposium on Antennas and Propagation and North American Radio Science Meeting, Montreal, Canada, 2021: 1035–1036.
- [76] REANEY I M, IDDES D. Microwave dielectric ceramics for resonators and filters in mobile phone networks[J]. *J Am Ceram Soc*, 2006, 89(7): 2063–2072.
- [77] OHIRA M, TAKANO K, MA Z. A novel deep-Q-network-based fine-tuning approach for planar bandpass filter design[J]. *IEEE Microw Wirel Co*, 2021, 31(6): 638–641.
- [78] WU W J, ZHANG W, LIU Q F, et al. Optimal design of LTCC filter by extracting human experience using fuzzy algorithm[C]//2016 11th International Symposium on Antennas, Propagation and EM Theory (ISAPE), Guilin, China, 2017: 500–503.
- [79] DU G Y, JIN L. Neural network of calibrated coarse model and application to substrate integrated waveguide filter design[J]. *Int J RF Microw C E*, 2020, 30(10): 1–17.
- [80] SUN J J, SUN S, YU X, et al. A deep neural network based tuning technique of lossy microwave coupled resonator filters[J]. *Microw Opt Techn Let*, 2019, 61(9): 2169–2173.
- [81] REZAEI P, TAYARANI M, KNÖCHEL R. Active learning method for the determination of coupling factor and external Q in microstrip filter design[J]. *Prog Electromagn Res*, 2011, 120: 459–479.

- [82] JAMSHIDI M, LALBAKSH A, MOHAMADZADE B, et al. A novel neural-based approach for design of microstrip filters[J]. *AEU-Int J Electron C*, 2019, 110: 152847.
- [83] CHANG J, LIU Z, MA M, et al. Parallel preparation and properties investigation on $\text{Li}_2\text{O}-\text{Nb}_2\text{O}_5-\text{TiO}_2$ microwave dielectric ceramics[J]. *J Eur Ceram Soc*, 2017, 37(13): 3951–3957.
- [84] LIANG C, HUANG J, GUO W, et al. Low temperature co-sintering simulation and properties analysis of 3D printed $\text{SiO}_2-\text{B}_2\text{O}_3$ nanoparticles based on molecular dynamics simulation[J]. *Comput Mater Sci*, 2022, 210: 111447.
- [85] WANG X, LI L, HONG W B, et al. Preparation and microwave dielectric properties of BPO_4 ceramics with ultra-low dielectric constant[J]. *J Mater Sci: Mater Electron*, 2021, 32(5): 6660–6667.
- [86] XI J, SHANG F, LIU F, et al. A facile preparation of temperature-stable borate ultra-low permittivity microwave ceramics for LTCC applications[J]. *Ceram Int*, 2020, 46(11): 19650–19653.
- [87] HE G, WANG H, LI Q, et al. A microwave dielectric ceramic with ultra-low dielectric constant prepared by reaction sintering method[J]. *J Electron Mater*, 2022, 51(9): 5026–5031.
- [88] LI Y, ZHOU J, SHEN J, et al. Ultra-low permittivity HSM/PTFE composites for high-frequency microwave circuit application[J]. *J Mater Sci: Mater Electron*, 2022, 33(13): 10096–10103.
- [89] NELO M, VAHERA T, SIPONKOSKI T, et al. Ultra-low permittivity ULTCC composite materials[J]. *Appl Phys Lett*, 2021, 118(14): 142901.
- [90] PÁLVÖLGYI P S, NELO M, PITKÄNEN O, et al. Ultra-low permittivity porous silica-cellulose nanocomposite substrates for 6G telecommunication[J]. *Nanotechnology*, 2020, 31(43): 435203.
- [91] 朱惠, 丁士华, 张云, 等. Zn^{2+} 掺杂 $\text{SrAl}_2\text{Si}_2\text{O}_8$ 陶瓷的结构及微波介电性能[J]. *硅酸盐学报*, 2021, 49(9): 1928–1934.
- ZHU Hui, DING Shihua, ZHANG Yun, et al. *J Chin Ceram Soc*, 2021, 49(9): 1928–1934.