

机器学习在材料研发中的应用

施思齐

(上海大学材料科学与工程学院, 上海 200444)

关键词: 材料设计; 材料数据; 机器学习

中图分类号: TB3; TP181

文献标志码: A

文章编号: 0454-5648(2023)02-0366-01

Application of Machine Learning in Materials Research & Development

SHI Siqi

(School of Materials Science and Engineering, Shanghai University, Shanghai 200444, China)

Keywords: materials design; materials data; machine learning

美国政府于 2011 年宣布启动“材料基因组计划”, 宣告“理性设计-高效实验-大数据技术”深度融合、协同创新这一新型材料研发模式的开启。基于此, 以数据驱动, 并具有更快、更准、更省地获得“成分-结构-工艺-性能”间相互关联特点的机器学习, 成为继“实验”、“理论”、“计算”后材料科学研究的“第四范式”中的核心要素。

目前, 材料科学领域已积累了大量的结构化(描述符)与非结构化(如图形、图像、文本)数据, 利用机器学习或深度学习模型能够从多源、异构的材料数据中挖掘潜在的有效信息, 已被广泛地应用于材料知识挖掘与表示、分子动力学势场的开发、新材料体系及其性质的预测、实用型材料发现等问题的研究。然而, 现阶段研究大都基于纯数据驱动的机器学习展开, 其性能极度依赖于数据质量, 同时机器学习结果还普遍存在不可解释性, 由此阻碍了其在材料科学领域的进一步推广。因此, 将材料领域知识与机器学习建模相融合, 构建数据与知识双向驱动的机器学习模型, 对于提升机器学习的普适性、准确性和可解释性, 以此推动高性能材料的设计与研发至关重要。这不仅顺应了第三代人工智能的发展趋势, 也为“AI for Science”战略背景下我国从制造大国向制造强国转变提供有力支撑。

本专题中, 来自上海大学、上海交通大学、复旦大学、华东理工大学、上海工程技术大学、南京理工大学、吉林大学、清华大学、北京大学、浙江

大学、北京信息科技大学、武汉理工大学、西安交通大学、大连海事大学、湖南大学、中山大学的相关领域专家学者对基于机器学习的材料制备及应用研究进行了详细介绍。专题包括 12 篇综述论文和 7 篇研究论文, 详细介绍了基于机器学习的电化学能源电池宏微观设计、热障涂层失效模式判别、多保真度数据学习算法的定量噪声评价、风化硅酸盐玻璃原成分预测及亚分类方法、机器学习原子势在锂金属负极中的应用、基于机器学习原子势函数的模拟软件开发及应用、机器学习在锂电池固态电解质研究中的应用、机器学习辅助的纳米催化反应动力学研究进展、二维材料催化活性描述符的研究进展、基于机器学习势函数的材料力热性质多尺度模拟研究进展、主动学习辅助材料研发进展、机器学习加速理论晶体结构预测的研究进展、热电材料设计、有机无机杂化钙钛矿材料带隙评估、基于晶体图卷积神经网络建立的金属表面能的预测框架、电介质材料的筛选与挖掘、新型 BCS 超导材料设计等材料研究方向的具体应用, 并阐述了目前机器学习应用于材料科学领域面临的数据质量问题及其解决方案。

目前, 利用材料基因组思想研发新材料受到国内外研究者和产业界的广泛关注, 涉及诸多材料体系和应用领域。由于篇幅限制, 本专题仅涉及到机器学习应用于材料科学的部分领域, 且有疏漏之处在所难免, 还请各位读者批评指正。