

特色专题

人工智能赋能超高温高熵陶瓷智能设计

田德祥^{1,2}, 卢佳琦^{1,2}, 李佩璇^{1,2}, 高兴誉³, 王毅^{1,2}, 宋海峰^{3*}, 李金山^{1,2*}

摘要 面对航空航天、深海探测、先进核能等国家重大战略领域对极端环境材料的迫切需求,传统材料体系在超高温、强腐蚀、高应力等复杂耦合工况下已接近性能极限。高熵陶瓷凭借其极其庞大的成分空间与卓越的极端环境性能,成为新一代战略材料。然而,其广阔的成分空间使得传统“试错”研发模式陷入“组合爆炸”困境,研发周期漫长且效率低下。如何实现高熵陶瓷的定向、高效设计,成为制约其工程化应用的瓶颈。系统分析了人工智能赋能超高温陶瓷(AI4UHTC)智能设计新范式。以超高温高熵陶瓷为典型材料,深入分析了该范式深度融合高通量计算与机器学习技术,驱动研发流程从“经验试错”向“知识辅助-数据驱动”的“智能设计”根本性转变。系统梳理了高熵陶瓷设计范式从经验试错、知识驱动、数据驱动到智能设计的演进逻辑,重点阐述了机器学习在可合成性精准预测、力学/热学/化学等关键服役性能设计与优化,以及多目标协同等方面的强大能力与应用实例。同时,深入剖析了当前智能设计在数据生态、模型可解释性、工艺集成及计算—实验闭环等方面面临的挑战。最终,“数据—模型—知识—智慧”自主进化路径和“AI多智能体”体系的构建,将高效推动超高温高熵陶瓷智能设计软件自主化并实现 AI4UHTC 的典型应用示范。

关键词 高熵陶瓷; 智能设计; 机器学习; AI4UHTC

在航空航天、深海探测及先进核能等国家重大战略领域,关键装备的服役环境正呈现出前所未有的极端化与复杂化趋势。从航空发动机叶片面对的 2000℃ 以上超高温气流冲击^[1-2],深海潜器面临的高压与强腐蚀环境侵蚀^[3-4],先进封装对“低热膨胀-高绝缘”的匹配特性^[5-6],单一物理性能的优化已难以满足现代工程对材料“多性能协同、长周期稳定、宽场景适配”的综合指标。金属材料在强腐蚀或高温环境下易失效,单

组元陶瓷存在低温脆性或高温相不稳定性,复合材料在超高温下的抗氧化性和结构稳定性降低^[7]。这些局限推动超高温材料转向高熵陶瓷(high-entropy ceramics, HECs)体系。HECs^[8]通常由 4 种及以上等摩尔比或近等摩尔比的金属阳离子与非金属元素形成的固溶体构成,涵盖高熵碳化物、氮化物、硼化物、氧化物等^[9],依托高熵 4 大效应^[10]:高熵效应、晶格畸变效应、缓慢扩散效应、鸡尾酒效应,实现性能突破性拓展。

传统超高温陶瓷(ultra-high temperature ceramics, UHTC)如 ZrB_2 、 HfC 被广泛应用于热防护部件^[11],但是受限于其固有脆性、高密度及疲劳抗性不足,其使用温度在 3000℃ 以下,而 HECs 的多组元设计进一步拓展了性能边界^[12],高熵碳化物熔点超过

1. 西北工业大学中国-哈萨克斯坦材料基因工程与智能科学“一带一路”联合实验室,西安 710072

2. 西北工业大学凝固技术全国重点实验室,西安 710072

3. 北京应用物理与计算数学研究所,北京 100094

收稿日期: 2025-12-10; 修回日期: 2026-01-28

基金项目: 国家重点研发计划项目(2024YFE0213600)

作者简介: 田德祥,博士研究生,研究方向为超高温陶瓷智能设计,电子邮箱: tdx@mail.nwpu.edu.cn; 宋海峰(通信作者),研究员,研究方向为凝聚态物理、材料多尺度模拟算法,电子邮箱: song_haifeng@iapcm.ac.cn; 李金山(共同通信作者),研究方向为钛合金、难熔及高温合金材料与成形技术,电子邮箱: ljsh@nwpu.edu.cn

引用格式: 田德祥,卢佳琦,李佩璇,等. 人工智能赋能超高温高熵陶瓷智能设计[J]. 科技导报, 2026, 44(13): 79-97; doi:10.3981/j.issn.1000-7857.2025.12.00051

3600℃, 且抗氧化性能优异^[13], (CrNbTaTiW)C 高熵碳化物在重离子辐照下表现出极低的肿胀特性^[14]; ($V_{0.2}Cr_{0.2}Nb_{0.2}Ta_{0.2}W_{0.2}$)B 高熵硼化物兼具高硬度和低密度^[15]; AB_2 型高熵二硼化物通过 Cr/Ti 等元素掺杂, 硬度突破至 48.3 GPa^[16]; 仿生结构高熵碳化物实现了高断裂韧性 ($12.5 \text{ MPa} \cdot \text{m}^{1/2}$) 与高温强度协同提升^[17]; 多孔高熵二硼化物在 2000℃ 下可以保持 690 MPa 的抗压强度, 打破了多孔陶瓷“隔热不承重”的局限^[18]; Zr/Mo 掺杂的 HECs 涂层^[19]在 2450℃ 高温下线烧蚀率为 $0.9 \mu\text{m/s}$ ^[20]; 高熵 $A_2B_2O_7$ 陶瓷可以将热导率压低至非晶态极限^[21]; 15 元阳离子的高熵陶瓷显著抑制熔融航空发动机沉积物的渗透^[22]; 在功能化应用上, 新型弛豫铁电陶瓷实现了 11.0 J/cm^3 的巨介电储能密度和 81.9% 的高效率^[23]; 高熵二硼化物在 1.5 mm 厚度下实现了 7.2 GHz 的超宽频微波吸收^[24]; 高熵压电陶瓷成功克服了高温去极化难题, 在高温下保持高电阻率^[25]。这种极其庞大的成分空间, 使 HECs 成为极端环境的核心候选战略材料。然而在面对航空航天及高超声速飞行器所需的 3000℃ 以上服役环境时, 经验试错模式的实验表征成本极高且周期漫长; 另一方面, 海量成分组合极易使研发陷入局部最优, 难以获

得兼顾耐超高温、抗氧化与高强韧综合性能的材料。HECs 材料的研发向智能设计范式转变成为必然^[26]。

当前, 材料科学的竞争已演变为算力、数据与平台生态的系统性对抗。2025 年 11 月, 美国白宫发布“创世计划”(Genesis Mission), 明确将人工智能(artificial intelligence, AI)驱动的新材料发现列为最高优先级^[27]。中国依托材料基因工程重点专项与“东数西算”工程, 已初步建成自主算力集群与材料大数据中心, 推动 AI 与新材料产业深度融合^[28]。针对超高温高熵陶瓷的研发, 迫切需要引入具备“认知—决策—执行”能力的 AI, 融合高通量计算、大数据与机器学习(machine learning, ML)技术, 实现多目标性能的精准筛选与定向创制, 推动材料研发从“被动筛选”向“主动创造”转变。

集成计算材料工程(integrative computational materials engineering, ICME)和材料基因工程(materials genome engineering, MGE)为破解上述瓶颈提供了革命性范式(图 1^[28])。智能设计通过深度融合高通量计算、大数据与 AI 技术, 重塑 HECs 的研发流程, 将材料研发从“经验试错”转向“智能设计”^[29-30]: 高通量计算在原子尺度实现海量筛选^[31]; ML 挖掘材料数据隐

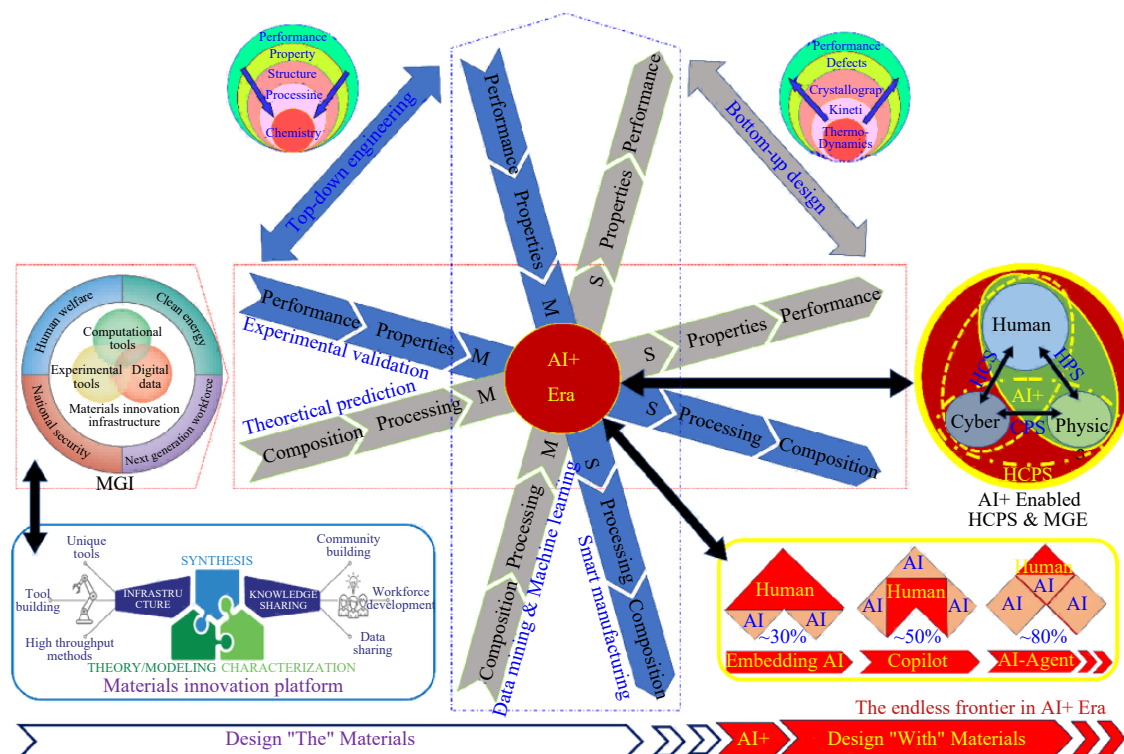


图1 AI 赋能时代背景下先进材料智能设计与制造范式从“材料设计”向“用材料进行设计”的范式转变驱动 AI+ 范式从嵌入式 AI、协作式 AI 到当前发展的 AI 智能体的跨越式发展

藏的构效关系^[32];高通量实验则负责快速验证与反馈,迭代优化流程^[33]。本文将重点阐述人工智能赋能超高温陶瓷(AI4UHTC)智能设计范式的演进逻辑,探讨ML在可合成性预测、关键性能设计及多目标优化中的应用实例,剖析其在数据基础设施、物理可解释性及制造闭环方面面临的挑战,为该领域建立自主可控的智能研发体系提供参考与展望。

1 HECs 设计范式的演变

HECs 极其庞大的成分空间与有限的实验/计算资源迫使设计范式不断升级,HECs 设计范式经历了经验试错、知识筛选、数据驱动、AI 赋能的智能设计演变(图2),同时呈现出明显的层次化演进特征:外层范式界定了研发的总体指导思想;中层则由相应的技术手段充实,知识驱动阶段依赖密度泛函理论(density functional theory, DFT)和相图计算(calculation of phase diagrams, CALPHAD),数据驱动阶段引入了ML;底层性能目标则随着范式的升级从单一维度向多维服役指标跨越,最终形成由AI驱动的智能闭环设计。

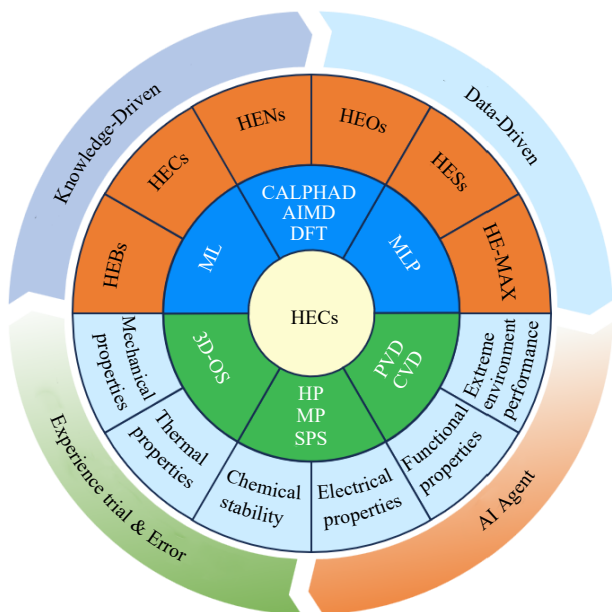


图2 超高温高熵陶瓷设计范式的演变

1.1 经验试错范式:直觉驱动的盲目探索

HECs 研究的初期,研究工作主要依赖于传统陶瓷工艺中积累的经验。该阶段的核心路径是执行“原料配比—高温烧结—性能测试”的循环流程,并以是

否成功合成单相结构及是否具备基本使用性能(如硬度、耐高温性)作为核心评价标准,本质上是一种基于归纳法的经验试错范式。2015年,Rost等^[34]受金属合金领域的研究活动和热力学基本原理的启发,将熵概念从金属扩展到五组分氧化物,制备出单相岩盐结构的(Mg,Co,Ni,Cu,Zn)O高熵氧化物。该成果首次从实验上验证了HECs体系的可合成性,并提出熵稳定在具有离子特性的化合物中有效的结论。这一阶段的发现开启了HECs领域的探索,为后续研究提供了初始样本。经验试错范式解决了HECs能否合成这一关键的问题,为范式演变奠定了基础。然而,面对高维成分空间,这种探索方式极易陷入局部最优,且难以通过有限的样本归纳出普适性的构效规律。经验试错范式的随机性与不可预测性,促使研究范式向具有理论指导的知识驱动阶段转型。

1.2 知识驱动范式:理论指引下的定向设计

随着HECs“可合成性”问题的解决,研究重心转向“规律指引+定向筛选”的知识驱动范式。该阶段引入了混合焓/熵、原子尺寸差异(δ)、价电子浓度(VEC)等热力学与电子结构参数作为物理判据^[35-36],将盲目的成分组合转变为基于理论预判的规律指引。研发逻辑演变为“性能目标导向→理论反向筛选→实验验证”。在此范式下,基于DFT的第一性原理计算、分子动力学(ab initio molecular dynamics, AIMD)模拟、CALPHAD等理论工具成为预测HECs成分、相稳定性、力学及抗氧化性能的核心工具。HECs中不同组成元素的异质氧吸附能力^[37],不同温度下氧分子的吸附与解离,氧原子的吸附构型与能量,以及扩散路径与能垒^[38]都可以有效预测。知识驱动范式标志着HECs的研究实现了以设计为主的范式演变,为后续的发展积累了可计算、可量化的数据(图3)。然而,知识驱动的计算成本随原子数量增长,五元以上的高熵固溶体的大尺度超胞模型耗时巨大,且难以精确处理复杂的非线性晶格畸变效应。这种局限性使范式向以规模化筛选为特征的数据驱动范式转变。

1.3 数据驱动范式:高通量计算构建的虚拟筛选

为突破知识驱动范式在高维成分空间筛选中的效率瓶颈,HECs研究进入了以高通量计算和规则筛选为标志的数据驱动范式。这一范式的核心在于“并行化生产”与“规则化筛选”。高通量计算利用超级计

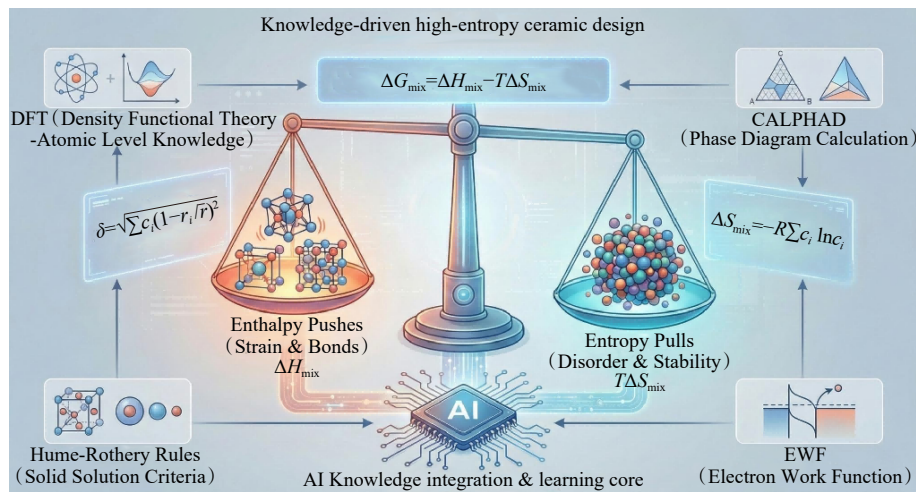


图3 知识驱动范式为智能设计提供理论依据

算集群的算力,通过建立自动化 workflow,对候选材料同时进行第一性原理或相图计算。高通量计算批量生产的形成能、弹性模量及电子结构数据,构建了 HECs 的初始结构化数据库。数据驱动范式的关键是从数据中提取有价值的信息,建立揭示“组分-结构-性能”内在联系的定量模型。最具代表性的是“熵形成能力(entropy forming ability, EFA)”^[39]描述符,通过高通量 DFT 计算高熵碳化物的能量分布谱,量化构型无序度对单相稳定性的影响,将单相稳定性的预测转化为数值阈值筛选问题,精准预测高熵碳化物的可合成性。此外,基于矩张量势构建高通量 MD 模型可以从几千万种高熵硼化物中筛选出熔点达 3765 K 的超高温材料^[40]。数据驱动范式将研研周期从数年缩短至数周,实现了研发效率的指数级提升及数据的原始积累。然而,该范式本质上属于基于预设规则的暴力筛选,面对多性能协同的复杂需求,这种范式尚不具备从数据中自主挖掘隐含规律并进行逆向设计的能力,这促使设计范式最终向智能设计跃迁。

1.4 智能设计范式:AI 赋能的精确预测

当前,HECs 研究正逐渐向以 ML 为核心的智能设计范式转变。该范式以知识和数据范式演变过程中积累的实验与计算数据为基础^[41],核心在于模型的自主学习、生成与决策,能够从数据中自主挖掘“成分-结构-性能”之间的复杂非线性关联模型。ML 根据学习范式与任务目标可分为:监督学习、无监督学习、强化学习、半监督/自监督学习。此外深度学习作为 ML 的重要分支,通过多层神经网络处理高维复杂数据

(如图像、序列),而生成式模型则能够学习数据分布并创造新的成分或结构,是实现逆向设计的关键。智能设计在 HECs 中的应用主要体现在 3 个维度的深化。

1) 高精度的正向预测:使用监督学习中的回归与分类算法替代实验,预测 HECs 的相稳定性、硬度、热导率等性能^[42]。例如,基于过渡金属二硼化物的 DFT 数据构建的监督学习模型,识别高熵硼化物硬度的准确率达 96.4%^[43]。

2) 数据结构的深度挖掘:应用无监督学习在缺乏标签或无标签数据下即实现成分聚类与异常检测,揭示材料的内在分类学特征。通过无监督学习构建多组分 UHTC 的结构图谱可以有效划分多组元陶瓷的固溶体形成边界^[44],为新型 HECs 设计提供参考。

3) 跨尺度的机理模拟:机器学习势(machine learning potential, MLP)可以融合 DFT 的高精度与 MD 的高效率,拟合原子间相互作用势能,在复杂的系统中重现原子相互作用,在扩展的时间和空间尺度上进行精确的大规模原子模拟。

传统的 ML 依赖于已知数据预测,而基于生成式 AI 的“逆向设计”范式(变分自编码器^[45]和扩散模型^[46])已被证明能够学习 HECs 和合金材料的隐空间分布,生成满足特定性能指标的全新高熵组分。集成大语言模型与自动化实验平台的 AI 智能体^[47],正实现从假设提出、实验规划到合成表征的全流程无人化闭环,使得在成千上万种候选组分中进行自主探索成为可能。智能设计范式的兴起,推动 HECs 从实验室探索进入工业化应用的“定制化、功能化、高效化”新时代。

2 HECs 智能设计应用实例

设计范式的演变为解决 HECs 复杂的成分-性能构效关系提供了理论基础。智能设计范式通过融合高通量计算与 ML, 构建了涵盖“相形成能力预测”

“关键服役性能筛选”及“多目标协同优化”的全链条设计体系。HECs 的智能设计工作流并非简单的算法堆砌, 而是一个包含数据治理、特征工程、模型训练与验证的系统工程^[48](图 4)。

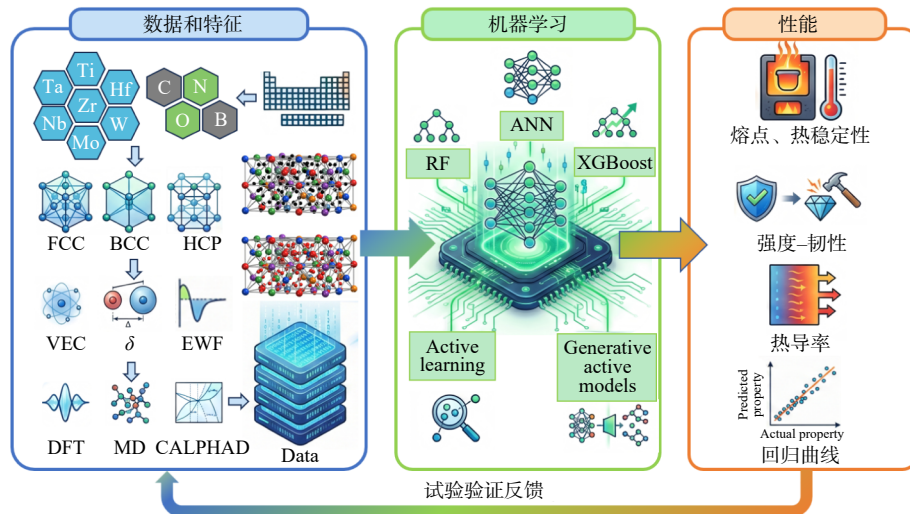


图 4 AI4UHTC 智能设计流程示意

1) 数据集收集: 数据的质量和数量决定了模型性能的上限。数据来源包括已发表的文献、材料数据库, 以及研究团队通过高通量计算或实验获得的数据。对于 HECs, 数据集通常包含材料的化学成分、晶体结构、制备工艺以及对应的性能(如硬度、弹性模量、相组成等)。

2) 特征工程: 特征工程的目标是从原始数据中提取出能够有效表征材料特性的“特征”或“描述符”, 作为模型的输入。此外, 特征工程还包括特征选择和特征构建等。提取的特征必须与目标性能高度相关。目前特征主要分为 2 类: 第 1 类是原子特征, 如原子半径差、电负性差、价电子浓度等, 这些特征易于获取且包含一定的物理内涵; 第 2 类是通过复杂计算或实验获得的特征, 如形成能、弹性张量等, 这类特征信息丰富但获取成本高。

3) 模型训练与选择: 在准备好特征和目标性能后, 模型的选择需根据任务属性(分类 vs 回归)及对“可解释性”的需求进行权衡。常用的算法包括线性回归、支持向量机(support vector machine, SVM)、随机森林(random forest, RF)、XGBoost、梯度提升决策树(gradient boosting decision tree, GBDT)及神经网络(neural network, NN)等。通过对比不同的算法, 并交

叉验证后, 在训练集和验证集上评估性能, 选择表现最优的模型加以部署。

4) 模型部署与验证: 模型的预测结果必须经过严格的实验验证。通过测试智能设计预测的候选材料的真实性能, 可以评估模型的准确性和泛化能力。当实验结果与预测不符时, 可能是模型过拟合、数据质量不佳或特征选择不当导致的。最终性能反馈至数据集提升模型性能。

2.1 可合成性与相稳定性预测

HECs 的可合成性是其性能实现与工程应用的前提, 稳态相的形成应被视为熵与焓、温度与动力学共同决定的结果^[49], 单靠构型熵的大小无法预测最终的微观结构^[50]。ML 方法通过计算模拟与模型构建, 高效筛选能形成单相均匀固溶体的成分体系, 为阐明哪些化学特征能驱动单相形成提供了可操作的路径。当前智能设计的研究覆盖 UHTC 体系内的碳化物、硼化物、稀土硅酸盐等, 形成了多维度的可合成性预测技术体系。

2.1.1 高熵碳化物推进的范式确立

高熵碳化物作为超高温防护与耐磨领域的核心候选材料, 以其丰富的数据积累, 成为验证智能算法有效性的“模型体系”。早期高熵碳化物的研究致力

大于量化“熵稳定效应”。通过高通量 DFT 计算,设定 $E_{\text{FA}} > 80 \text{ atom/eV}$ 的阈值作为单相形成判据。基于此训练的 RF 模型,对岩盐结构碳化物的预测准确率达到 85%^[51]。但是数据稀缺与不平衡是制约高熵碳化物单相预测模型性能的关键瓶颈,训练数据集小,高 E_{FA} 样本稀缺,导致模型对极高 E_{FA} 值的预测结果偏低,同时由于依赖 DFT 计算与实验数据,外推至其他体系时,准确性下降。

为突破数据瓶颈,当前研究主要演化出 2 条增强路径。一种是在实验设计层面增强,通过主动学习(active learning, AL)方法(图 5^[52]),迭代反馈,优先测试“不确定性高”的区域,通过对比基于成分的特征向量生成方式,部署模型生成 E_{FA} 预测的平均值与分布,再提取“高 E_{FA} 值”的新训练数据点。该方法将

高熵碳化物的筛选数量扩展至 15504 种。另一种路径是算法层面的增强,通过生成合成数据来平衡正负样本,如自适应合成少数类过采样技术(ADASYN)辅助 ML^[53],通过文献实验数据与原子环境映射结构图生成半合成数据,将 K 近邻模型的预测准确率提升至 92%。并且结合 SHAP(Shapley additive explanations)分析特征重要性,明确原子半径差、电负性差等参数对单相形成的主导作用。尽管合成数据缓解了样本稀缺问题,但也引入了潜在的认知偏差。ADASYN 生成的虚拟样本仅在统计学分布上拟合原始数据,缺乏第一性原理的物理约束。若原始训练集中存在实验误差,算法生成的“伪数据”极易放大这些偏差,导致模型产生违背物理常识的幻觉预测。

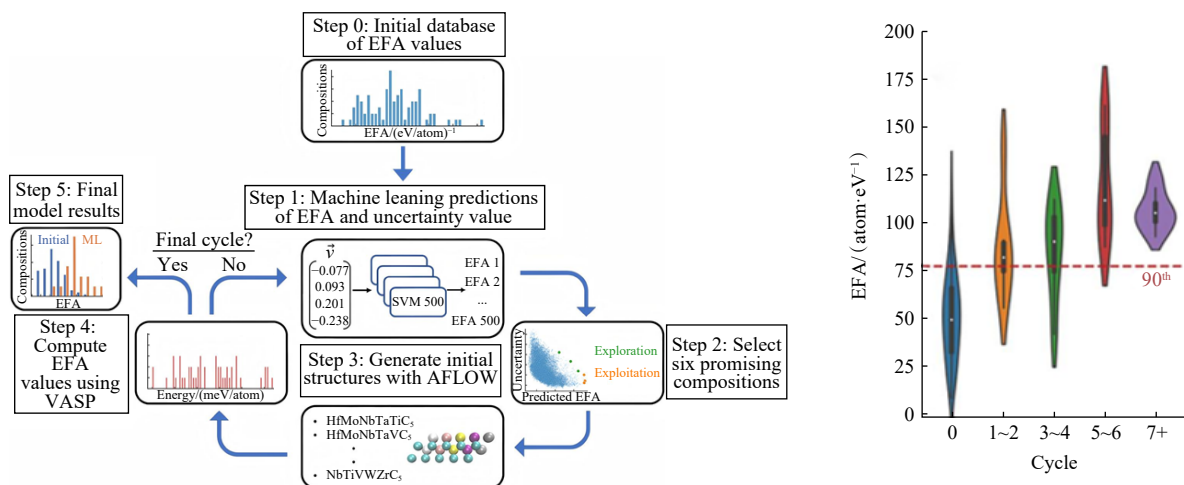


图 5 高熵碳化物 AL 流程示意

此外,也可通过物理化学参数(元素的电离能、电子亲和能)作为特征输入预测可合成性^[54],在预测 5~9 元非等原子比体系时,ML 预测模型准确率达 0.938、接近 DFT 数据训练的模型准确度,纠正了“等原子比即最佳”的传统认知偏差。除了数据策略,模型架构的升级与实验闭环验证同样关键。NN 模型预测过渡金属碳化物、硼化物的单相形成能力准确率高达 94.63%^[55]。结合高通量实验与算法的闭环系统,预测高熵碳化物相形成准确率的精度为 93.4%^[56]。这些案例标志着智能设计完成了从“虚拟筛选”到“物理实现”的闭环。

2.1.2 高熵硼化物、硅酸盐等多体系的范式拓展

随着高熵碳化物研究体系的成熟,研究重点正向

结构更复杂、数据更匮乏的高熵硼化物、硅酸盐及氮化物等体系迁移,目前主要有 3 类路径。

第 1 类是算法层面的完善,如高通量固相反应技术与 GA 算法结合筛选出关键描述符(如费米能级差、电负性差等),可以实现等摩尔成分高熵六硼化物的高精度预测(准确率为 93.0%)^[57]。针对复杂高熵稀土硅酸盐体系因缺乏标准数据集而难以建模的问题,研究人员提出了层级分类策略^[58]。该策略将预测任务分解为“合成可能性判别(I类)”与“具体相结构细分(II类)”2 个层级;在此基础上,利用 GA 模型为这 2 个层级分别筛选出针对性的描述符组合。最终,该模型成功预测 6045 种未报道的多组分硅酸盐,整体准确率高达 96.2%,实现了对具体相结构的精准判定。

第2类路径是构建新的通用热力学描述符,突破特定化学成分与晶体结构的限制。Divilov 等^[59]提出“无序焓-熵描述符(disordered enthalpy-entropy descriptor, DEED)”,通过量化多组分体系中熵增与焓损的热力学平衡,实现多组分陶瓷可合成性的通用分类。与EFA相比,DEED结合卷积算法显著提升了对

高熵碳氮化物与硼化物的预测精度(图6^[39,59])。然而,EFA和DEED本质上是基于理想温度下的静态热力学描述符,忽略了UHTC制备过程中极其关键的动力学因素(如冷却速率、固相扩散势垒)。因此,在预测急冷或等离子火花烧结等非平衡工艺制备亚稳态HECs时,容易出现预测偏差。

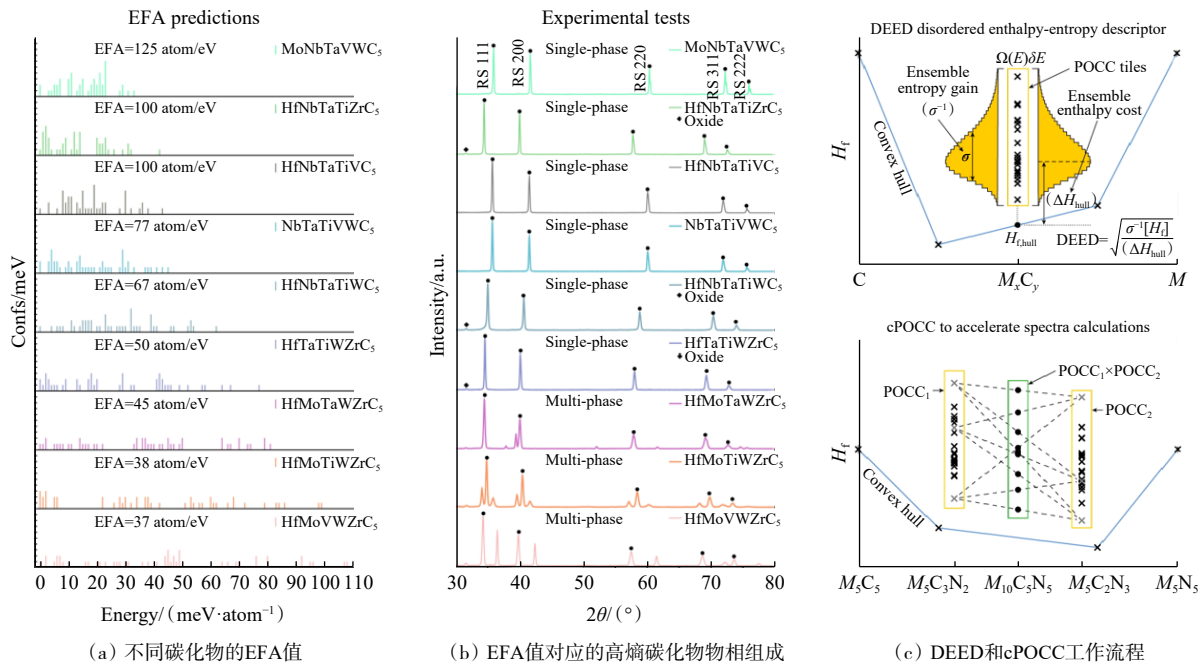


图6 EFA和DEED描述符在预测高熵碳氮化物可合成性的应用

第3类路径聚焦于算法的可解释性,即在“黑箱模型”的精度与物理意义之间寻求平衡。RF模型预测MSi₂型高熵硅化物晶体结构的精度达96.82%^[60],但难以直接给出物理公式。SISSO(sure independence screening and sparsifying operator)这一可解释性ML技术可以应用于高熵氮化物陶瓷的EFA预测^[61]。SISSO可以从高维空间中“蒸馏”出具有物理意义的解析表达式,明确价电子浓度与原子尺寸差的耦合作用对EFA的提升机制。因此,针对不同数据量级与特征维度,算法的选择至关重要(图7),SISSO可以处理小数据场景(左下区域);随着数据量与特征复杂度的增加(沿红色虚线向右上演进),NN与GNN则能更好地捕捉非线性构效关系。

综上所述,智能设计在HECs的可合成性预测上取得了显著进展,但仍面临“数据-机理”层面的双重挑战。缺乏高质量的负样本使得分类模型难以精准界定单相与多相的相图边界;当前模型多聚焦于常温或

合成温度下的成相能力,而UHTC应用的核心挑战在于预测材料在环境下的相稳定性;当前的通用描述符(EFA、DEED)基于混合焓/熵的竞争机制,在预测实际合成的可行性时可能失效;UHTC的微观结构演化高度依赖于烧结工艺。因此,未来的模型必须从单纯的“成分判别”转向“成分+工艺”的双模态学习,引入高温Gibbs自由能及扩散动力学参数,将烧结温度、压力及升降温速率纳入特征空间,弥补理论预测与工程制备之间的差异,筛选出适用极端环境的高熵材料。

2.2 关键服役性能的定向优化

HECs的核心价值在于其优异的多场景性能,如超高温稳定性、高硬度、低热导率、强耐蚀性等。通过建立“成分-工艺-结构-性能”的定量关联模型,实现关键性能的精准预测与定向优化,是HECs智能设计的核心目标。当前研究已覆盖力学性能(硬度、韧性、弹性模量)、热学性能(熔点、热膨胀系数、热导率)、化学稳定性(抗氧化性、耐腐蚀性)等多个维度,

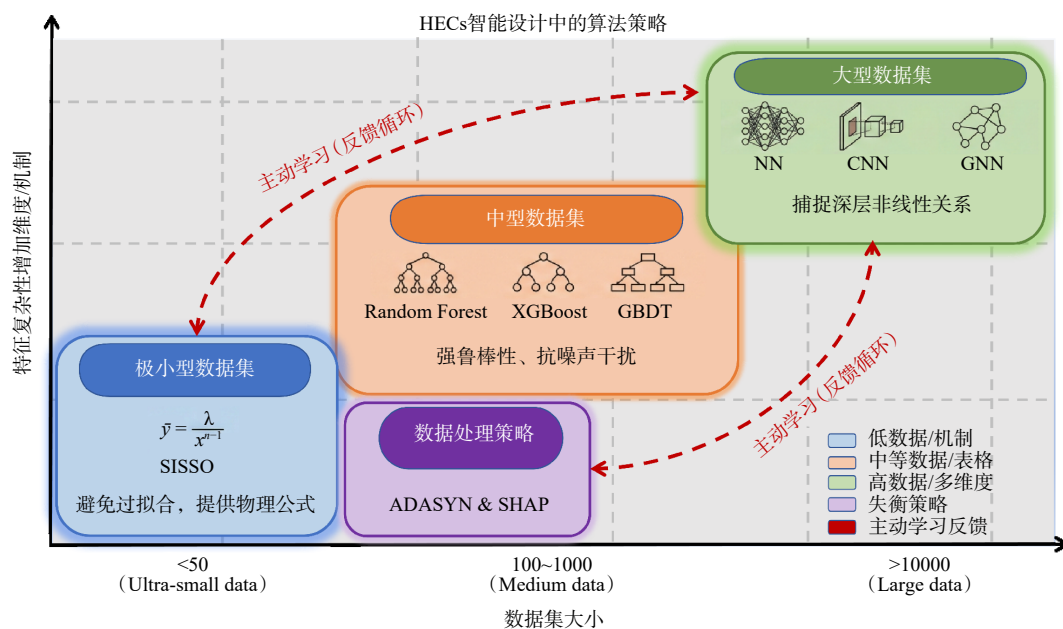


图7 ML模型算法选择策略

形成多性能预测的技术体系。

2.2.1 力学性能预测

2.2.1.1 硬度

硬度是 HECs 在耐磨、切削工具等领域应用的核心指标,由于硬度受化学键强度、微观组织(晶粒尺寸、气孔率)及制备工艺的多重控制,其智能预测研究主要围绕算法模型的适配性优化、物理特征的深度挖掘及小样本/工艺数据 3 个维度展开。支持向量回归(support vector regression, SVR)模型可以构建含 230 种高熵碳化物的力学性能数据库($R>0.93$),用于筛选高硬度组分^[62]。针对标准的表格型数据,即由“化学成分描述符(如 VEC、 δ 、 $\Delta\chi$)”与“工艺参数(如烧结温度、压力)”构成的多维特征矩阵,集成学习算法表现出优异的鲁棒性。影响鲁棒性的因素包括特征冗余与高相关性、数据不平衡、小样本与噪声等。集成学习算法在对抗“小样本数据噪声”与“特征冗余”时,通过引入自助采样和特征随机子空间,平均化多个决策树的预测降低模型的方差。在预测高熵碳化物硬度时, XGBoost 的测试集 R^2 为 0.827, 优于 RF(0.763)和 SVR(0.802), 且 RMSE 最低, 展现了在有限数据下的最佳泛化能力^[63]。此外也可以采用特征递归消除或 SHAP 值分析来提升鲁棒性。SHAP 分析结合 GBDT 算法构建的模型在验证集上的决定系数 $R^2>0.93$, 高于训练集(0.858)和测试集(0.876), 实

现了 22.94 GPa 硬度($\text{Hf}_{0.2}\text{Zr}_{0.2}\text{Ti}_{0.2}\text{Ta}_{0.2}\text{Mo}_{0.2}\text{B}_2$)的准确预测^[64]。但是集成模型在预测非等摩尔体系时存在过拟合现象,泛化能力较差,而基于注意力机制的 CrabNet(compositionally restricted attention-based network)通过深入捕捉化学式中的元素交互特征,在筛选新型高力学性能 HECs 时表现出更高的可靠性^[65]。

在特征工程维度,研究正从简单的物理参数堆砌转向“知识嵌入与特征交互”,通过物理优化模型的 ML 被用于预测 HECs 的硬度^[66],麻雀搜索算法(sparrow search algorithm, SSA)优化反向传播神经网络(backpropagation neural network, BPNN)的输入参数,有效解决了传统 BPNN 易陷入局部最优的问题。该模型预测 HECs 的硬度值与 DFT 计算结果偏差小于 3%。此外,“数据驱动+知识赋能”的反馈验证循环模型(图 8^[67])结合 SHAP 分析可以从 149 个特征中锁定电子功函数(electron work function, EWF)等特征为影响硬度的关键因子^[67],相比于价电子浓度, EWF 不仅能以此为基础建立定量的幂律比例模型,还能更好地区分元素周期表中同一族溶质元素的差异,为多组分陶瓷的硬度设计提供新算法与特征构建思路。

针对材料研发中的“数据稀缺”与“工艺黑箱”问题,部分研究开始将结构参数纳入模型。通过 1120 个尖晶石样品构建的含 112 个数据点的实验数据库,筛选

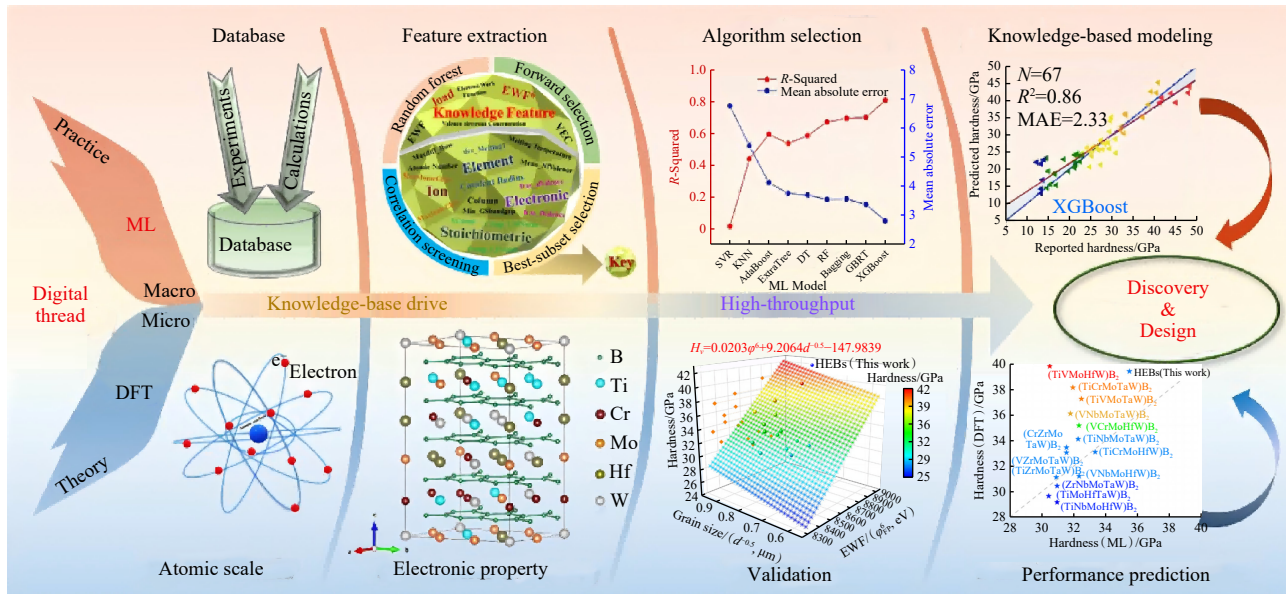


图8 数据与知识驱动的超硬高熵二硼化物设计策略逻辑框架

出的 $(\text{Al}_2\text{Fe}_{0.25}\text{Zn}_{0.25}\text{Mg}_{0.25}\text{Mn}_{0.25})\text{O}_4$ 硬度达1770.6 HV^[68]。数据增强生成对抗网络(data augmentation generative adversarial networks, DAGAN)驱动的设计策略可以解决高熵氮化物数据短缺的问题^[69], DAGAN生成半合成数据,使ML模型的准确率提升14.67%,筛选出8个硬度超40 GPa的超硬氮化物体系。

尽管上述模型在预测硬度方面表现优异,但现有研究多基于室温硬度数据,对于超高温服役场景,材料高温硬度保持率才是决定其抗冲刷、耐磨损性能的关键。受限于高温测试数据的匮乏,当前模型难以直接预测高温硬度。未来的AI4UHTC研究需结合物理模型(如热激活滑移机制),建立从“室温本征硬度”推演“高温力学衰减”的迁移学习模型。

2.2.1.2 韧性

断裂韧性是制约陶瓷材料应用的关键瓶颈,断裂韧性涉及跨尺度的协同机制,包括原子键合强度的影响,晶界、第二相及位错等微观结构的控制。

针对经典的“硬度-韧性”倒置矛盾,融合多物理场计算是实现微观结构调控的有效途径。相图计算、实验与ML整合构建的 $(\text{Ti,Zr,Hf})\text{C}$ 的智能设计^[70],利用CALPHAD指导等温时效工艺生成高密度纳米级球变结构。这种特殊的微观结构诱导了位错增殖与裂纹偏转,使材料硬度(2780 HV)与断裂韧性 $(3.47 \text{ MPa}\cdot\text{m}^{1/2})$ 较烧结态分别提升32%和80%。

在成分筛选维度,构建“物理方程驱动”的混合模

型,可以作为挖掘高韧性组分的核心策略。图9^[71]所示为数据驱动与知识驱动的高熵氧化物建模优化流程,将理论物理方程(如晶格畸变模型)作为先验知识嵌入 $\text{A}_2\text{Zr}_2\text{O}_7$ 型高熵氧化物的断裂韧性(K_{IC})模型^[71]。该模型明确了稀土掺杂诱导的晶格畸变与位错阻碍是增韧的核心机制,从4万余种组合中精准筛选出 $(\text{La}_{0.2}\text{Gd}_{0.2}\text{Y}_{0.2}\text{Yb}_{0.2}\text{Lu}_{0.2})_2\text{Zr}_2\text{O}_7$,其 K_{IC} 为 $2.8 \text{ MPa}\cdot\text{m}^{1/2}$,较未掺杂体系提升35%。但现有的研究中DFT计算一般采用理想超胞,未考虑A/B位空位、氧空位/间隙等本征缺陷的影响,在UHTC应用背景下,断裂韧性不仅关系到材料的抗损伤能力,更决定了陶瓷部件在急速升温(如高超声速飞行器再入段)过程中的抗热震性能。智能设计在优化韧性的同时,必须兼顾其对热应力的缓解作用,以确保结构件在剧烈热冲击下的完整性,未来需要构建包含缺陷形成能与浓度的真实物理模型,实现UHTC高韧性、低热导率与相稳定性的多目标缺陷工程设计。

2.2.1.3 弹性模量

弹性模量是材料结构设计的关键参数,其预测模型需反映原子间键合强度与晶体结构的影响。卷积神经网络(convolutional neural network, CNN)模型^[72]利用材料的成分描述符,预测HECs的体积、剪切、杨氏弹性模量的结果与文献报道结果一致,且预测精度满足工程需求。该研究避免了结构信息缺失导致的模型偏差,适用于大规模材料筛选与结构分析,但CNN

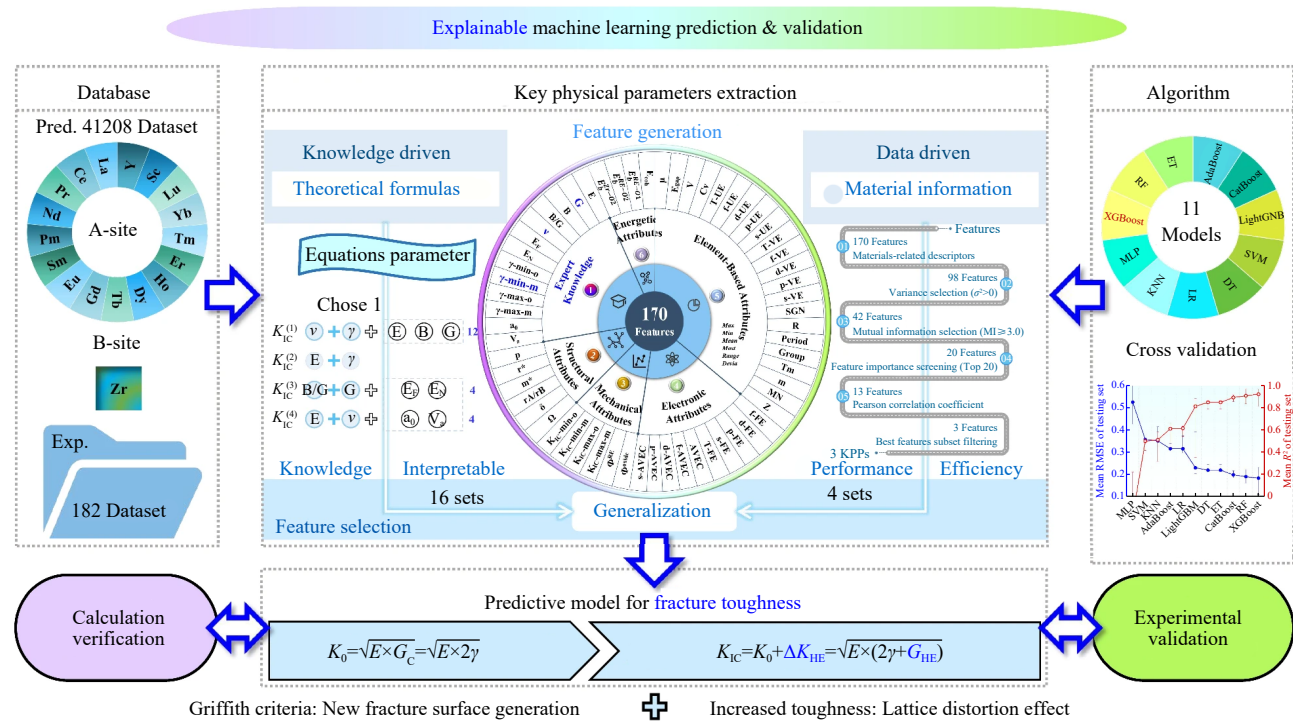


图9 数据驱动与知识驱动的高熵氧化物建模优化原则/标准

模型为“黑箱”模型,缺乏可解释性,无法阐明成分与弹性模量的内在关联机制。同时,对于屈服强度、断裂韧性及应力-应变曲线等涉及晶格缺陷演化与非线性变形行为的非准静态参数,单纯依赖成分或晶胞尺度的CNN模型仍面临挑战。此类性能不仅取决于内禀的原子键合(成分),更受控于介观尺度的微观组织(如晶粒尺寸、气孔、第二相分布)。

综上分析,当前的力学性能智能预测研究,呈现出明显的“重硬度、轻韧性/高温蠕变”的结构性失衡。这主要是因为硬度测试简单、数据量大且易于标准化。对于UHTC的工程应用,“高韧性”与“抗蠕变”是材料在极端热冲击与长时服役下的关键性能。但是断裂韧性与高温蠕变涉及长时间尺度下的空位扩散与位错攀移,简单的“成分-性能”黑箱模型难以捕捉这些涉及晶界滑移、孔隙演化及第二相协同的复杂介观行为。因此,未来的智能设计必须从单一硬度预测转向对“硬度-韧性”综合性能的权衡优化,并引入多尺度特征融合策略,从单纯的静态回归转向多尺度融合范式,利用计算机视觉提取微观组织特征,采用物理信息神经网络(physics-informed neural networks, PINN)将断裂力学与蠕变本构方程嵌入损失函数,实现对材料全生命周期力学行为的预测。

2.2.2 热力学性能预测

热力学性能(熔点、热膨胀、热导率)决定了UHTC在极端环境下的服役极限。与室温力学性能不同,高温热力学行为涉及显著的声子非谐性与动态原子相互作用,因此其智能预测重点在于捕捉非线性特征交互与实现高温动力学的高精度模拟。

2.2.2.1 熔点

熔点是UHTC在热防护、航空发动机等领域应用的核心指标,对该指标的预测研究呈现出从“广域数据挖掘”向“精细原子模拟”分化的趋势。MLP能够以DFT/MD的精度模拟原子在高温下的动态行为,从包含一元与二元碳化物的小数据集构建具有广泛适用性的神经网络势(neural network potential, NNP),预测结果与DFT计算及实验高度一致^[73]。深度学习势(deep learning potential, DLP)函数预测(TiZrTaHfNb)_{C_{0.75}N_{0.25}}的熔点为3580 K,并揭示了价电子浓度通过优化电子结构平衡氮含量与热稳定性的内在机制^[74]。

2.2.2.2 热膨胀系数

热膨胀系数(coefficient of thermal expansion, CTE)是决定涂层与基底热匹配失效的关键。通过DFT构建3360个高熵碳化物的数据集捕捉CTE的非线性变化(误差<5%),RF模型结合SHAP分析明确了平

均原子质量、晶格畸变等特征是影响 CTE 的关键因素,为热障涂层、电子封装等对热匹配要求高的领域提供材料设计依据^[75]。

2.2.2.3 热导率

低热导率是 HECs 作为热障涂层材料的核心优势,由于热导率受复杂的声子-声子散射及晶格畸变控制,传统的线性回归模型往往失效。多维各向异性特征交互(multi-dimensional anisotropic feature interaction, DAFI)技术通过提取“原子半径差-电负性差”等高阶交互项,可以显著增强 XGBoost 和 RF 模型对声

子散射机制的表征能力,预测 $A_2B_2O_7$ 型 HECs 热导率的值与实测值偏差小于 3%^[76]。混合知识辅助-数据驱动的 ML 策略可以通过控制阴阳离子半径比的值优化 $A_2B_2O_7$ 型高熵氧化物 A 位 17 种稀土溶质的组合^[77];从 6188 种 $(5RE_{0.2})_2Zr_2O_7$ 高熵氧化物中筛选出热导率低至 $1.2 \text{ W}/(\text{m}\cdot\text{K})$ 的材料,较传统 YSZ 热障涂层降低 50%,并准确捕捉多元素掺杂诱导的晶格畸变对声子传播的阻滞效应(图 10^[77])。此外 DLP 可在原子尺度重现复杂热物理过程,实现 $(Zr_{0.2}Hf_{0.2}Ti_{0.2}Nb_{0.2}Ta_{0.2})C$ 高熵碳化物高温下的晶格热导率动态模拟^[78]。

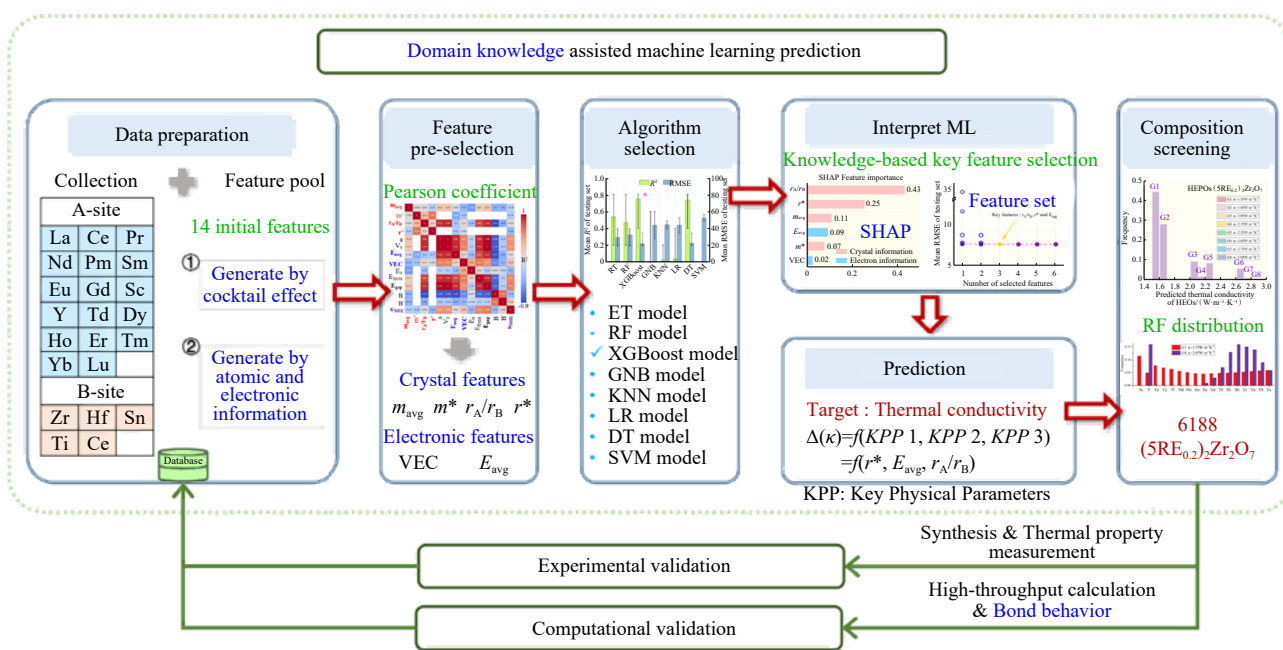


图 10 超低热导率高熵氧化物筛选策略的工作流

尽管上述模型在处理复杂非线性热物理行为方面展现了强大能力,但目前的研究多集中于准静态或稳态热性能的预测。针对 UHTC 服役场景,材料往往处于剧烈的非平衡热冲击与相变边缘。未来的智能热力学模型需要结合 AIMD 与有限元分析,发展能够耦合高温相变潜热、辐射传热及动态热应力演化的跨尺度智能预测框架,指导极端动态环境下的热防护材料设计。

2.2.3 化学稳定性预测

2.2.3.1 抗氧化性

HECs 的抗氧化行为是一个受热力学与动力学势垒共同控制的复杂物理化学过程,涉及复杂的非线性相变(如氧化膜的熔化、挥发或剥落)。Bai 等^[38]提出了一种结合第一性原理与 ML 的原子尺度分析方法,计算了高熵碳化物表面的氧吸附能与电荷密度差,揭

示了不同金属元素对氧化化学势的敏感度差异。模型发现,电子局域化程度较低的区域更易成为氧化形核位点。预测了 Ta/Hf 元素在高熵基体中的优先氧化倾向,这种优先氧化形成的致密氧化物层(如 Ta_2O_5 、 HfO_2)在热力学上降低了后续氧化的驱动力。多目标优化^[79]筛选出的 $(TiZrHfNbTa)C$ 具有高构型熵与优异的抗氧化性,并且揭示了高熵组分中晶格畸变、电子结构和氧化行为之间的耦合机制,但是静态氧化模型无法描述气流冲刷下的动态烧蚀行为。因此,针对 UHTC 场景的智能设计,必须从单纯的“增重/失重预测”转向“氧化过程动态演化”的精准识别。

2.2.3.2 耐腐蚀性

耐腐蚀性是 HECs 在化工、海洋工程等领域应用的核心需求,涉及复杂的熔体渗透润湿、界面化学溶

解及析晶动力学机制。数据的量化难是建模的主要障碍。在稀土二硅化物的研究中引入腐蚀分级函数^[80],将定性的钙镁铝硅酸盐(calcium-magnesium-aluminum-silicate, CMAS)腐蚀形貌转化为定量的梯度数据,可以有效降低高维特征空间的噪声;通过XGBoost算法实现对350万种低成本稀土(Yb/Tm/Er等)五元非等摩尔组合的快速筛选。

2.2.4 位错行为与结构稳定性

位错是影响陶瓷材料塑性与韧性的核心微观结构因素,陶瓷位错塑性的离子键与共价键混合、位错核心结构复杂的难点一直是该方向的研究重点。智能设计通过ML力场模拟高熵碳化物的位错行为,预测出(110)[1 $\bar{1}$ 0]滑移系统的剪切强度,揭示严重晶格畸变和局部化学无序驱动1/2<110>位错的核心诱因^[81]。此外,针对基于高通量计算构建的以ZnO、GaN、SrTiO₃等功能陶瓷为验证对象的神经网络势(neural network potential, NNP),对非化学计量比核心结构、滑移势垒及长程静电相互作用的捕获能力,与实验结果高度吻合^[82]。这种通用的NNP框架为探索HECs中复杂的“位错-溶质原子”交互机制提供了新的思路。

2.2.5 其他性能预测

除了基础的力学与热学指标,HECs在工程服役中还面临耐磨性、晶格畸变及界面稳定性等复杂性能的挑战。在耐磨性设计方面,SVR模型揭示了NbTaMoWAlC涂层中Al元素添加引起的硬度提升的原因是细化晶粒与增强晶格畸变的协同效应,磨损率较无Al体系降低30%^[83];针对高熵材料“鸡尾酒效应”的核心来源,基于DFT数据库的人工神经网络(artificial neural network, ANN)模型预测了多组分过渡金属碳化物的弹性模量、硬度及局部畸变程度,量化了V-Nb-Ta基体系中畸变场对硬度与韧性的增强贡献^[84];在相界面特性方面,过渡金属碳化物原子间势模型,适用于典型晶体结构(岩盐、萤石、尖晶石)及熔融与表面结构,预测精度与DFT方法相当,实现了晶界偏析、堆垛层错等动态行为的大尺度模拟^[85]。

当前HECs的研究主要集中在等摩尔比成分空间,以利用最大组态熵效应来稳定单相结构。但近期的研究表明,非等摩尔比设计是突破HECs性能极限的重要途径。在UHTC的硬度与韧性平衡设计中,利用ML结合高通量实验,发现特定的非等摩尔高熵六

硼化物能够显著优化材料的合成能力与力学性能^[57]。针对(TiZrHfNbTa)C体系,特定的非化学计量比能够通过局域晶格畸变效应进一步提升材料的硬度^[65]。在稀土硅酸盐的研究中非等摩尔设计对于相稳定性、热物理性能和抗CMAS腐蚀性能至关重要^[80],利用AL和贝叶斯优化等算法,可以在庞大的非等摩尔空间中高效筛选出具有目标性能的特定成分配比。

除阳离子位的高熵化外,阴离子位的掺杂与调控(如C/N、C/B等)也是目前智能预测的重要方向。阴离子种类的变化改变了陶瓷内部的化学键性质,从而对材料的本征性能产生决定性影响。在高熵碳化物中引入N形成碳氮化物,可以显著改善材料的抗氧化性能^[74,86]。利用ML势函数和DFT计算,可以精准预测不同C/N比对高熵碳化物中晶格畸变、电子结构以及力学模量和热膨胀系数的影响,通过调节阴离子亚晶格中的N含量可以有效调控价电子浓度^[63],进而优化硬度与韧性平衡。

2.3 多目标协同设计与性能权衡

单一性能的提升往往伴随着其他性能的下降,如何利用AI在庞大的成分空间中寻找帕累托前沿是当前研究热点。目前HECs的ML研究主要集中在性质预测和相稳定性筛选。高熵合金领域已经广泛使用非支配排序遗传算法(NSGA-II)^[87]、多目标贝叶斯优化(multi-objective Bayesian optimization, MOBO)算法^[88]等,而HECs在平衡强度、韧性和熔点等方面的多目标优化研究尚处于起步阶段。这主要是陶瓷缺乏像金属那样的多滑移系变形机制,其性能对微观结构(气孔、晶界)极度敏感,导致帕累托前沿的搜索空间狭窄且不连续。因此,借鉴成熟领域的算法策略,构建适用于HECs的“正向预测-逆向设计”的设计体系,是突破这一瓶颈的关键。

针对经典的“强度-塑性”难题,“正向ML预测+逆向启发式搜索”的协同策略为此提供了有效路径。CALPHAD与ML整合可以实现(Ti,Zr,Hf)C硬度(2780HV)与韧性(提升80%)的同步优化^[70]。金属基复合材料“强度-韧性”权衡问题的“正逆向循环”策略展现了极高的预测准确率:在正向预测阶段,构建覆盖常见结构、协同增强结构、性能损害结构的数据集,采用RF模型和10折交叉验证。在逆向阶段,将屈服强度与断裂伸长率设定为多重约束,利用GA在

庞大的微观结构空间中搜索最优解,实验验证性能提升15%~20%^[89]。而通过粒子群优化与深度生成网络,可实现对金属材料原子级界面结构的自动化寻优^[90]。尽管上述策略源于金属领域,但其“正向预测-逆向优化”的逻辑可以学习并迁移至超高温 HECs,用于协调高温稳定性与力学性能的复杂冲突。Gu 等^[43]建立了鲁棒的 ML 筛选准则,结合硬度预测及物理描述符识别能通过微观结构调控(如相变增韧)来缓解脆性的候选组分,实现了超硬高熵二硼化物硬度与韧性的平衡。在抗氧化与热力学稳定性的协同优化方面,通过 ML 与 GA 的闭环策略,在多维空间寻优筛选出兼具单相稳定性和优异抗氧化性的非等摩尔高熵碳化物,打破了传统试错法难以兼顾多目标的局限^[37]。

多目标优化仍是在已知空间内“筛选”,要实现真正的“逆向设计”,可以通过晶体结构的数字化表征探索。基于半导体材料的简化线性输入晶体编码系统

(SLICES)^[91]通过字符串编码实现了晶体拓扑结构的可逆与不变表示(覆盖4万余种结构,重构准确率94.95%),结合强化学习,该系统实现了半导体陶瓷的生成式逆向设计,可根据带隙宽度等目标输出对应的晶体结构。HECs 需要应对超高温、高压与强辐射的耦合挑战,用于极端条件下材料性能模拟的 ProME v1.0 平台(图11^[92]),实现了多组分合金极端条件(超高温、高压、强辐射)下的性能集成计算。平台各软件组件解决了合金成分设计时模拟中的关键难题(如高温扩散、辐射损伤),在保证性能的前提下有效减少贵金属含量。该平台推动了计算材料科学与工程应用的融合:通过高通量 DFT 生成数据→利用 ML 模型挖掘描述符与性能的关联→指导实验合成进行验证,并将实验结果反馈至数据库,用于模型迭代优化,实现了“实验室算法”向“工程化应用”的转变,为 HECs 的多目标优化设计提供了关键的参考方案。

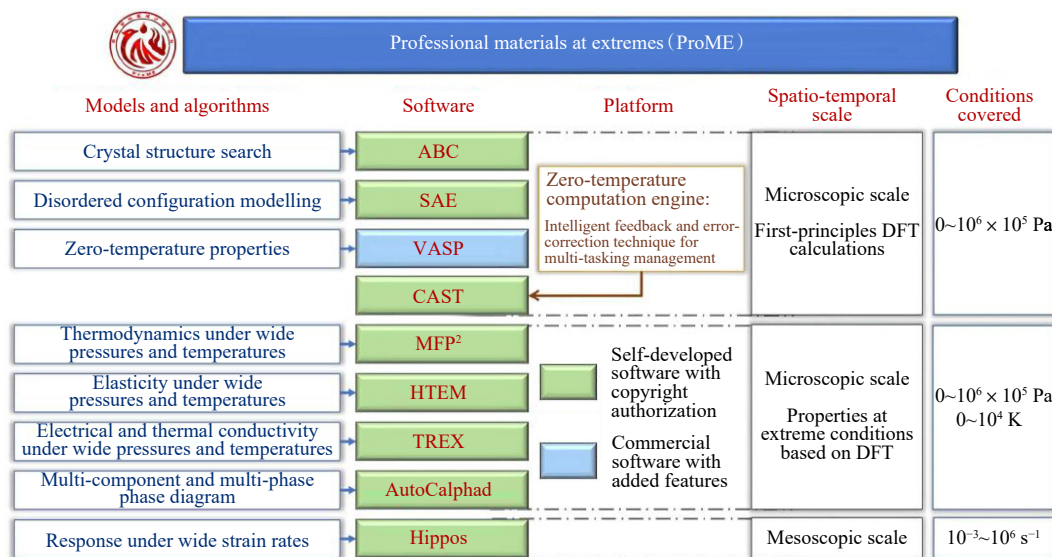


图 11 ProME v1.0 平台工作流程

3 挑战与展望

当前,智能设计范式展现了强大的材料发现与预测能力,但 HECs 研发向“智能创制”的全面迈进,仍面临数据、机理与验证体系等核心瓶颈。展望未来,超高温 HECs 的智能设计必须在 MGE 与 ICME 的宏观图景下进行规划。其发展的核心路径是从当前辅助科研的工具阶段,向实现“数据模型化—模型算法化—算法软件化—软件自主化”的全链条自主进化跃

迁,最终构建“数据(Data)—模型(Model)—知识(Knowledge)—智慧(Wisdom)”的智能自主研发范式。

3.1 数据模型化与数据生态构建

“数据—模型—知识—智慧”的自主进化,始于坚实的数据底座,因此必须超越当前碎片化、孤岛化的数据现状,构建自主可控的 HECs 数据生态。现有的通用无机材料数据库主要涵盖理想化学计量比下的晶体结构与形成能数据。针对超高温 HECs 核心应用场景,即高温、高压、强辐照等极端条件下的多性

能耦合数据(如高温蠕变-抗氧化协同、高温高压下的相稳定性)极为稀缺。此外,正负样本分布的非均衡性愈发严重,现有的数据积累主要来源于文献报道,而学术发表普遍存在“发表偏倚”,倾向于记录成功的实验结果,而忽略合成失败的“负样本”。然而,对于构建高精度的判别模型而言,负样本与正样本具有同等的训练价值。未来需要通过数字线程技术,构建贯穿高通量计算、实验到服役的“成分—工艺—结构—性能—服役”全链条数据,保障数据安全与可信共享,将离散的数据点汇聚为支撑国家材料创新的战略资源^[93]。通过建设标准化、可追溯的专用数据库,实现“数据积累”到“数据模型化”的转变。

3.2 模型算法化与智能体跨越

对于航空发动机叶片、高超声速飞行器热防护系统等涉及高风险领域的 UHTC 材料^[94], SHAP 和 SISSO 等方法能一定程度上量化特征的重要性,但仍然需要保持高度的审慎甚至批判态度。目前 ML 模型本质上仍是基于概率论的统计拟合工具,如基于室温数据训练的 UHTC 热导率模型能达到极高的拟合优度 ($R^2 > 0.90$),但是高 R 值忽略了超高温环境下起主导作用的声子非谐性散射或晶界滑移机制。由于数据稀缺,模型极易获得虚高的预测精度,在面对极端环境的外推时,会产生没有物理意义的预测结果。因此,未来的智能设计必须从特征重要性排序转向物理约束与因果推断演进:融合符号回归、PINN 等技术,挖掘并形成可解释的物理规律,增强模型的规律推理能力与领域外推可靠性;利用量纲分析和物理规律作为正则化项约束损失函数,使模型学习符合物理直觉的映射关系。

另一方面,要推动智能设计从“嵌入式 AI”的辅助工具向“AI4Mater”(AI for Materials)转变,将 AI 应用于材料领域的综合框架^[95]。“AI4Mater”可以整合 ML、自主实验、智能计算和制造,集成大语言模型的理解力、强化学习的决策力,发展具备认知与决策能力的 AI 多智能体(AI Multi-Agent),提升材料价值链中的创新、效率和可扩展性。

3.3 算法软件化与数字孪生闭环

智能设计算法的价值在于工程化应用,“算法软件化”即将核心智能算法封装为标准化、模块化的工业软件与工具链,服务于全产业链。智能实验室和数

字孪生是实现虚实融合的关键技术:利物浦大学开发的移动机器人^[96],由贝叶斯搜索算法驱动执行光催化实验,识别出活性为初始配方 6 倍的光催化剂混合物;加州大学伯克利分校与劳伦斯伯克利国家实验室(Lawrence Berkeley National Laboratory, LBNL)打造的 A-Lab^[97]系统集成自动配料、球磨混合、高温烧结及 XRD 鉴定模块,结合 GNoME 深度学习模型,AL 算法能基于热力学相图调整工艺参数进行迭代优化,合成了 41 种新型材料;在复杂体系寻优方面,中国科学技术大学研发的机器化学家(AI-Chemist)平台^[98]仅用 6 周时间便从 376 万种潜在配方中筛选出性能最优的陨石基析氧催化剂;上海硅酸盐所的 MatMind 材料大模型通过 DREAMLab 平台^[99],实现了 1200 个工艺控制点全覆盖,形成“智能模型+实验平台”的闭环协作。数字孪生通过构建高保真的虚拟材料系统,实时映射实验制备、性能测试与服役过程,形成一个“数据—模型—实验”的闭环反馈系统^[100]。智能实验室与数字孪生技术的应用,可以指导实体中试平台进行验证,形成“智能设计—数字孪生—自主实验—产业中试”的快速闭环,加速 HECs 从实验室发现到工程化应用的跨越,为中国航空航天、先进核能等领域提供自主可控的材料解决方案,重塑战略材料产业竞争格局。

3.4 AI4UHTC 软件自主化与范式革命

已知最高熔点的 Hf-Ta-C 体系极限约为 3990℃,随着高超声速飞行器向 Mach 15+迈进及先进核堆推进技术的重启,材料的服役环境温度正逼近甚至超过 4000℃。面对上述挑战,AI4UHTC 不仅是算法的优化,更需要实现“软件自主化”,形成具备“智慧”—自进化、自适应的智能研发系统。围绕“软件自主化”应重点围绕以下 3 个方向。

1) 从预测模型向“AI-Agent”进化: AI-Agent 应具备感知、规划、决策能力的智能,自主拆解复杂的材料设计任务,调用不同的工具(如 DFT、热力学软件、文献数据库)来解决问题。

2) 构建垂直领域的大型多模态模型(large multimodal models, LMMs): 通用的 GPT 模型缺乏材料科学的逻辑严密性。未来需要材料科学文献、晶体结构数据库,构建出具备跨尺度的理解能力,能够从微观电子结构推演宏观服役性能,解决“小数据”样本

下泛化难题的 LMMs。

3) 打造自主实验室: 打破计算与实验的物理隔阂, 建立由 AI 控制的自动化合成与表征平台。AI 根据预测结果自动下发实验指令, 机器人完成配料、烧结与测试, 数据实时反馈给 AI 修正模型。通过 AI 闭环模式, 把新材料的研发周期从年缩短至“周”甚至“天”。

通过上述方向整合, 一个集成海量数据、领域知识、多尺度模型与智能决策内核的 AI4UHTC 自主软件系统, 将能根据国家重大工程对超高温、强抗氧化等极端性能需求, 主动定义问题、生成材料解决方案、驱动全流程验证并持续迭代。自主软件打通从“设计”到“材料及部件服役”的路径, 实现材料设计范式革命, 推动 HECs 在航空发动机、深空探测等极端环境装备中从概念材料加速转化为服役环境下的部件。

4 结论

1) 范式演变的必然性: 针对 HECs“组分无限、结构无序、工况极端”的特征, 传统试错实验与单一尺度模拟已难以应对“组合爆炸”挑战。智能设计范式通过融合高通量计算产生数据、ML 挖掘规律, 将材料研发从“盲目筛选”转变为“定向寻优”。

2) 全流程赋能的实效性: AI 已深度渗透至 HECs 研发的各个环节。在可合成性方面, 基于描述符工程突破了单相固溶体的预测瓶颈, 发现了各类亚稳态新体系; 在性能预测方面, 集成学习与深度神经网络精准建立了“成分—结构—性能”的非线性映射, 解决硬度与韧性倒置、高温抗氧化机理复杂等难题; 在工艺优化方面, 多目标遗传算法实现多属性协同提升。

3) 未来跃迁的方向: 尽管当前仍面临小样本数据稀缺与模型可解释性不足的挑战, 但随着 AI-Agent、LLMs 以及自主实验室的兴起, AI 将逐步进化为具备自主决策能力的“科研专家”。未来, 通过推进“数据—模型—知识—智慧”的自主进化, 构建具备“认知—决策—执行”能力的 AI4UHTC 智能材料研发系统, 将是推动超高温高熵陶瓷在极端环境应用的关键。

参考文献 (References)

[1] Wyatt B C, Nemani S K, Hilmas G E, et al. Ultra-high temperature ceramics for extreme environments[J]. *Nature*

Reviews Materials, 2024, 9(11): 773–789.

[2] Ni D W, Cheng Y, Zhang J P, et al. Advances in ultra-high temperature ceramics, composites, and coatings[J]. *Journal of Advanced Ceramics*, 2022, 11(1): 1–56.

[3] Eswarappa Prameela S, Pollock T M, Raabe D, et al. Materials for extreme environments[J]. *Nature Reviews Materials*, 2023, 8(2): 81–88.

[4] Pan F, Liu J Q, Zuo Z H, et al. Miniature deep-sea morphable robot with multimodal locomotion[J]. *Science Robotics*, 2025, 10(100): eadp7821.

[5] Han L L, Zhu S Y, Rao Z Y, et al. Multifunctional high-entropy materials[J]. *Nature Reviews Materials*, 2024, 9(12): 846–865.

[6] Schweidler S, Botros M, Strauss F, et al. High-entropy materials for energy and electronic applications[J]. *Nature Reviews Materials*, 2024, 9(4): 266–281.

[7] Liu Y X, Wang H, Hao J C, et al. Key materials for extreme high-temperature environments: Ultra-high-temperature ceramics and their composites[J]. *Extreme Materials*, 2025, 1(1): 38–66.

[8] Oses C, Toher C, Curtarolo S. High-entropy ceramics[J]. *Nature Reviews Materials*, 2020, 5(4): 295–309.

[9] Nemani S K, Torkamanzadeh M, Wyatt B C, et al. Functional two-dimensional high-entropy materials[J]. *Communications Materials*, 2023, 4: 16.

[10] 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.

[11] Xu X T, Pan X H, Huang S S, et al. Effect of WB addition on long ablation behavior of ZrB_2 - $MoSi_2$ coating[J]. *Corrosion Science*, 2021, 192: 109814.

[12] Bilsborough J, Neilsen-Burke H, Khatamifar M, et al. Review of monolithic and matrix composite ceramic sandwich structures for integrated thermal protection in hypersonic vehicles[J]. *Composites Part B: Engineering*, 2025, 307: 112906.

[13] Wen Z H, Liu Y W, Yang J, et al. Exceptional oxidation resistance of high-entropy carbides up to 3600°C[J]. *Advanced Materials*, 2025, 37(34): e2507254.

[14] Tunes M A, Fritze S, Osinger B, et al. From high-entropy alloys to high-entropy ceramics: The radiation-resistant highly concentrated refractory carbide (CrNbTaTiW)C[J]. *Acta Materialia*, 2023, 250: 118856.

[15] Qin M D, Yan Q Z, Wang H R, et al. High-entropy monoborides: Towards superhard materials[J]. *Scripta Materialia*, 2020, 189: 101–105.

[16] Feng L, Monteverde F, Fahrenholtz W G, et al. Superhard

- high-entropy AlB_2 -type diboride ceramics[J]. *Scripta Materialia*, 2021, 199: 113855.
- [17] Zhu Z J, Liu Y W, Qin Y B, et al. Tough and strong bioinspired high-entropy all-ceramics with a contiguous network structure[J]. *Nature Communications*, 2025, 16: 4587.
- [18] Wen Z H, Tang Z Y, Liu Y W, et al. Ultrastrong and high thermal insulating porous high-entropy ceramics up to 2000°C[J]. *Advanced Materials*, 2024, 36(14): e2311870.
- [19] Li J C, Chen Y J, Zhao Y M, et al. Super-hard $(\text{MoSiTiVZr})_{\text{Nx}}$ high-entropy nitride coatings[J]. *Journal of Alloys and Compounds*, 2022, 926: 166807.
- [20] Sun W W, Yang Y, Zhao H J, et al. Influence of Zr or Mo on the ablation performance of high-entropy carbide coatings above 2400°C[J]. *Journal of the European Ceramic Society*, 2026, 46(5): 118047.
- [21] Zhao Z F, Ruan Z Y, Li R, et al. High entropy pyrochlore $(\text{La}_{0.3}\text{Gd}_{0.3}\text{Ca}_{0.4})_2(\text{Ti}_{0.2}\text{Zr}_{0.2}\text{Hf}_{0.2}\text{Nb}_{0.2}\text{Ta}_{0.2})_2\text{O}_7$ ceramic with amorphous-like thermal conductivity for environmental/thermal barrier coating applications[J]. *Journal of Materials Science & Technology*, 2025, 205: 315–326.
- [22] Cheng F H, Dingwell D B, Song W J. Ultra-high entropy rare earth phosphate against environmental corrosion[J]. *Nature Communications*, 2025, 16: 9447.
- [23] Peng H N, Wu T T, Liu Z, et al. High-entropy relaxor ferroelectric ceramics for ultrahigh energy storage[J]. *Nature Communications*, 2024, 15: 5232.
- [24] Gu F C, Wang W, Meng H, et al. Lattice distortion boosted exceptional electromagnetic wave absorption in high-entropy diborides[J]. *Matter*, 2025, 8(3): 102004.
- [25] Wu J, Ma X S, Zhou D H, et al. High-entropy high-temperature high-piezoelectricity ceramics[J]. *Advanced Materials*, 2025, 37(17): 2419134.
- [26] Raguraman S, Griebel A, Priyadarshini M S, et al. A call to elevate the role of processing in AI-driven materials design[J]. *Nature Reviews Materials*, 2025, 10(12): 875–876.
- [27] Executive Office of the President. Genesis Mission: AI-driven materials discovery[R]. Washington, D. C. : The White House, 2025.
- [28] 王毅, 李高楠, 刘哲, 等. 材料基因工程与智能科学: AI+时代无尽前沿[J]. 科技导报, 2025, 43(12): 93–109.
- [29] 宿彦京, 付华栋, 白洋, 等. 中国材料基因工程研究进展[J]. 金属学报, 2020, 56(10): 1313–1323.
- [30] 汪洪, 向勇, 项晓东, 等. 材料基因组: 材料研发新模式[J]. 科技导报, 2015, 33(10): 13–19.
- [31] 王冠杰, 李开旗, 彭力宇, 等. 高通量自动流程集成计算与数据管理智能平台及其在合金设计中的应用[J]. 金属学报, 2022, 58(1): 75–88.
- [32] 谢建新, 宿彦京, 薛德祯, 等. 机器学习在材料研发中的应用[J]. 金属学报, 2021, 57(11): 1343–1361.
- [33] 王海舟, 汪洪, 丁洪, 等. 材料的高通量制备与表征技术[J]. 科技导报, 2015, 33(10): 31–49.
- [34] Rost C M, Sachet E, Borman T, et al. Entropy-stabilized oxides[J]. *Nature Communications*, 2015, 6: 8485.
- [35] McCormack S J, Navrotsky A. Thermodynamics of high entropy oxides[J]. *Acta Materialia*, 2021, 202: 1–21.
- [36] Sarkar A, Breitung B, Hahn H. High entropy oxides: The role of entropy, enthalpy and synergy[J]. *Scripta Materialia*, 2020, 187: 43–48.
- [37] Li Y L, He L, Pan H, et al. Compositional optimization for enhanced oxidation resistance of high-entropy carbide ceramics[J]. *Acta Materialia*, 2025, 282: 120463.
- [38] Bai Y, Liang Y X, Bi J, et al. Atomic-scale oxidation mechanism of high-entropy carbides *via* density functional theory and *ab initio* molecular dynamics[J]. *Journal of the American Ceramic Society*, 2025, 108(6): e20448.
- [39] Sarker P, Harrington T, Toher C, et al. High-entropy high-hardness metal carbides discovered by entropy descriptors[J]. *Nature Communications*, 2018, 9: 4980.
- [40] Meng H, Liu Y W, Yu H L, et al. Machine-learning-potential-driven prediction of high-entropy ceramics with ultra-high melting points[J]. *Cell Reports Physical Science*, 2025, 6(2): 102449.
- [41] Cao B, Yang S, Sun A K, et al. Domain knowledge-guided interpretive machine learning: Formula discovery for the oxidation behavior of ferritic-martensitic steels in supercritical water[J]. *Journal of Materials Informatics*, 2022, 2(2): 4.
- [42] Zhang J, Xiang X P, Xu B, et al. Rational design of high-entropy ceramics based on machine learning—A critical review[J]. *Current Opinion in Solid State and Materials Science*, 2023, 27(2): 101057.
- [43] Gu X L, Shan Y F, Lu W Y, et al. A robust criterion for designing superhard high-entropy transition metal diborides[J]. *Acta Materialia*, 2025, 296: 121310.
- [44] Mitra R, Gupta A, Biswas K. A simple recipe for designing multicomponent ultra-high temperature ceramic classes by using structure maps coupled with machine learning[J]. *Journal of Applied Physics*, 2024, 136(4): 045104.
- [45] Li W, Shen Z H, Liu R L, et al. Generative learning facilitated discovery of high-entropy ceramic dielectrics for capacitive energy storage[J]. *Nature Communications*, 2024, 15: 4940.
- [46] Abu-Mualla M, Crabtree E, Michael F, et al. Inverse design of alloys *via* generative algorithms: Optimization and diffusion within learned latent space[J]. *Advanced Intelligent*

- Discovery, 2026, 2: e202500069.
- [47] Ghafarollahi A, Buehler M J. Automating alloy design and discovery with physics-aware multimodal multiagent AI[J]. PNAS, 2025, 122(4): e2414074122.
- [48] Yuan J H, Li Z, Yang Y J, et al. Applications of machine learning method in high-performance materials design: A review[J]. Journal of Materials Informatics, 2024, 4: 14.
- [49] Liu Y F, Wu R F, Sun H, et al. High-entropy $\text{CeNbO}_{4+\delta}$ -based ceramics with ultrahigh comprehensive thermosensitive performances[J]. ACS Applied Materials & Interfaces, 2024, 16(22): 28861–28873.
- [50] Ogawa T, Tanaka M, Kawashima N, et al. Controllable crystalline phases of multi-cation oxides[J]. Advanced Science, 2025, 12(20): 2412280.
- [51] Kaufmann K, Maryanovsky D, Mellor W M, et al. Discovery of high-entropy ceramics *via* machine learning[J]. npj Computational Materials, 2020, 6: 42.
- [52] Leverant C J, Harvey J A. Accelerating the discovery of new, single phase high entropy ceramics *via* active learning[J]. Chemistry of Materials, 2024, 36(22): 10994–11003.
- [53] Mitra R, Bajpai A, Biswas K. ADASYN-assisted machine learning for phase prediction of high entropy carbides[J]. Computational Materials Science, 2023, 223: 112142.
- [54] Guo W J, Wang L Y, Zhu L A, et al. Accelerated discovery and formation mechanism of high-entropy carbide ceramics using machine learning based on low-cost descriptors[J]. Journal of Alloys and Compounds, 2024, 1004: 175929.
- [55] Arviso M, Bermudez E A, Ornelas A F, et al. Discovery of high-entropy ultra-high temperature ceramics through neural networks[C]//Proceedings of AIAA SCITECH 2025 Forum. AIAA, 2025: AIAA2025–2689.
- [56] Meng H, Yu R W, Tang Z Y, et al. Formation ability descriptors for high-entropy carbides established through high-throughput methods and machine learning[J]. Cell Reports Physical Science, 2023, 4(8): 101512.
- [57] Meng H, Tang Z Y, Bai H, et al. Accelerating the discovery of high-entropy hexaborides by data-driven prediction: From equimolar to non-equimolar[J]. Journal of the American Ceramic Society, 2024, 107(9): 6456–6464.
- [58] Meng H, Wei P, Tang Z Y, et al. Data-driven discovery of formation ability descriptors for high-entropy rare-earth monosilicates[J]. Journal of Materiomics, 2024, 10(3): 738–747.
- [59] Divilov S, Eckert H, Hicks D, et al. Disordered enthalpy-entropy descriptor for high-entropy ceramics discovery[J]. Nature, 2024, 625(7993): 66–73.
- [60] Sun S P, Sun H F, Jiang Y. Exploration of MSi_2 -type high entropy silicides by machine learning and first-principles calculations[J]. International Journal of Refractory Metals and Hard Materials, 2026, 134: 107464.
- [61] Lin T Y, Wang R L, Liu D Z. Machine learning-based prediction of stability in high-entropy nitride ceramics[J]. Crystals, 2024, 14(5): 429.
- [62] Zhou Q, Xu F, Gao C Z, et al. Machine learning-assisted mechanical property prediction and descriptor-property correlation analysis of high-entropy ceramics[J]. Ceramics International, 2023, 49(4): 5760–5769.
- [63] Wang A Z, Liu J C, Guo L W, et al. Intelligent prediction and oriented design of high-hardness high-entropy ceramics[J]. Journal of Materials Research and Technology, 2025, 36: 6015–6023.
- [64] Zhou J, Wang A Z, Wang H F, et al. Data-driven assisted design and quantitative prediction of hardness in high-entropy boride ceramics[J]. Materials Today Communications, 2025, 46: 112800.
- [65] Zhao X, Cheng S G, Yu S, et al. Predicting mechanical properties of non-equimolar high-entropy carbides using machine learning[J]. Digital Discovery, 2025, 4(1): 264–274.
- [66] Huang Z H, Wang H Y, Li C, et al. Feature engineering *via* sure independence screening sparifying operator and sparrow search algorithm optimized artificial neural network reveals hardness descriptors for $(\text{Nb-Ti-V-Zr})\text{C}$ ceramics[J]. Materials Today Physics, 2025, 58: 101841.
- [67] Lu J Q, Zhang F P, Wang W Y, et al. Discovering superhard high-entropy diboride ceramics *via* a hybrid data-driven and knowledge-enabled model[J]. Journal of the American Ceramic Society, 2023, 106(11): 6923–6936.
- [68] Chen Z Y, Yang D Y, Li X H, et al. Machine-learning-assisted multi-element optimization of mechanical properties in spinel refractory materials[J]. Materials, 2025, 18(8): 1719.
- [69] Zhou Q, Xu F, Gao C Z, et al. Design of high-performance high-entropy nitride ceramics *via* machine learning-driven strategy[J]. Ceramics International, 2023, 49(15): 25964–25979.
- [70] Zhang Z X, Hou C Y, Zhang Z Y, et al. Data-driven design of spinodal decomposition in $(\text{Ti, Zr, Hf})\text{C}$ composite carbides for optimizing the hardness-toughness trade-off[J]. Advanced Functional Materials, 2025, 35(36): 2502555.
- [71] Zhang Y, Ren K, Wang W Y, et al. Smart design $\text{A}_2\text{Zr}_2\text{O}_7$ -type high-entropy oxides through lattice-engineering toughening strategy[J]. npj Computational Materials, 2024, 10: 277.
- [72] Nam C. Prediction of mechanical properties of high-entropy

- ceramics by deep learning with compositional descriptors[J]. *Materials Today Communications*, 2023, 35: 105949.
- [73] Liu Y W, Meng H, Zhu Z J, et al. Predicting mechanical and thermal properties of high-entropy ceramics *via* transferable machine-learning-potential-based molecular dynamics[J]. *Advanced Functional Materials*, 2025, 35(16): 2418802.
- [74] Baidyshev V S, Tantardini C, Kvashnin A G. Melting simulations of high-entropy carbonitrides by deep learning potentials[J]. *Scientific Reports*, 2024, 14: 28678.
- [75] Kim M, Kim J, Kim H, et al. High-throughput data-driven machine learning prediction of thermal expansion coefficients of high-entropy solid solution carbides[J]. *International Journal of Refractory Metals and Hard Materials*, 2024, 122: 106738.
- [76] Wen W, Yan X X, Pei X H, et al. Multi-dimensional anisotropic feature interaction with machine learning to predict the thermal conductivity of $A_2B_2O_7$ -type high-entropy ceramics[J]. *Ceramics International*, 2025, 51(13): 17860–17869.
- [77] Zhang Y, Ren K, Wang W Y, et al. Discovering the ultralow thermal conductive $A_2B_2O_7$ -type high-entropy oxides through the hybrid knowledge-assisted data-driven machine learning[J]. *Journal of Materials Science & Technology*, 2024, 168: 131–142.
- [78] Dai F Z, Wen B, Sun Y J, et al. Theoretical prediction on thermal and mechanical properties of high entropy $(Zr_{0.2}Hf_{0.2}Ti_{0.2}Nb_{0.2}Ta_{0.2})C$ by deep learning potential[J]. *Journal of Materials Science & Technology*, 2020, 43: 168–174.
- [79] Lin H, Yang Y, Zhao L Q, et al. Research on component design strategy and anti-oxidation performance of high entropy carbide ultrahigh temperature ceramics[J]. *AIP Advances*, 2025, 15(10): 100703.
- [80] Qian B, Liang W, Tu Y M, et al. Data-driven accelerated design of non-equimolar rare-earth silicates with phase stability and high CMAS resistance at 1550°C[J]. *Journal of Alloys and Compounds*, 2025, 1042: 184100.
- [81] Liu J, Luo K, Zhou R, et al. Understanding the role of 1/2 $\langle 110 \rangle$ dislocations in deformation mechanisms of single-crystal high-entropy carbide ceramics from machine learning force field simulations[J]. *ACS Applied Engineering Materials*, 2024, 2(7): 1857–1865.
- [82] Zhang S H, Li Y, Suzuki S, et al. Neural network potential for dislocation plasticity in ceramics[J]. *npj Computational Materials*, 2024, 10: 266.
- [83] Shi X Q, Xu F, Gao C Z, et al. Microstructure, mechanical and wear mechanisms of NbTaMoWAlC high entropy ceramics coating designed based on chemical descriptors[J]. *Materials Today Communications*, 2025, 46: 112831.
- [84] Zhang J, He L, Xiong Y X, et al. Local-distortion-informed exceptional multicomponent transition-metal carbides uncovered by machine learning[J]. *npj Computational Materials*, 2024, 10: 162.
- [85] Dai F Z, Xu Y F, Wang Y N, et al. A general deep neural network potential model for transition metal carbides[J]. *Journal of the American Ceramic Society*, 2025, 108(9): e20647.
- [86] Li Y L, Wang Y, Lin N, et al. Disentangling the oxidation mechanisms of high-entropy carbonitrides[J]. *Corrosion Science*, 2025, 249: 112850.
- [87] Dey D, Pal A, Biyani P, et al. Developing new high-entropy alloys with enhanced hardness using a hybrid machine learning approach: Integrating interpretability and NSGA-II optimization[J]. *Journal of Materials Science*, 2025, 60(10): 4820–4845.
- [88] Xu W B, Diesen E, He T W, et al. Discovering high entropy alloy electrocatalysts in vast composition spaces with multi-objective optimization[J]. *Journal of the American Chemical Society*, 2024, 146(11): 7698–7707.
- [89] Zhong Z Y, An J, Wu D, et al. A machine learning strategy for enhancing the strength and toughness in metal matrix composites[J]. *International Journal of Mechanical Sciences*, 2024, 281: 109550.
- [90] Cheng Y Y, Shu R, Sun H L, et al. Machine learning-assisted interfacial modulation and configuration design of metal matrix composites: A review[J]. *Materials Today Communications*, 2025, 46: 112504.
- [91] Xiao H, Li R, Shi X Y, et al. An invertible, invariant crystal representation for inverse design of solid-state materials using generative deep learning[J]. *Nature Communications*, 2023, 14: 7027.
- [92] Wang W Y, Zhang S Y, Li G N, et al. Artificial intelligence enabled smart design and manufacturing of advanced materials: The endless Frontier in AI+era[J]. *Materials Genome Engineering Advances*, 2024, 2(3): e56.
- [93] 国家数据局. 国家数据局关于印发《可信数据空间发展行动计划(2024—2028年)》的通知[EB/OL]. (2024-11-21) [2025-12-01]. https://www.gov.cn/zhengce/zhengceku/202411/content_6996363.htm.
- [94] 李筱暄, 付前刚, 文子豪, 等. 极端环境用超高温陶瓷结构材料研究进展[J]. *无机材料学报*, 2025, 40(10): 1045–1078.
- [95] Jiang X, Xue D Z, Bai Y, et al. AI4Materials: Transforming the landscape of materials science and engineering[J]. *Review of Materials Research*, 2025, 1(1): 100010.
- [96] Burger B, Maffettone P M, Gusev V V, et al. A mobile

- robotic chemist[J]. *Nature*, 2020, 583(7815): 237–241.
- [97] Szymanski N J, Rendy B, Fei Y X, et al. An autonomous laboratory for the accelerated synthesis of inorganic materials[J]. *Nature*, 2023, 624(7990): 86–91.
- [98] Zhu Q, Huang Y, Zhou D L, et al. Automated synthesis of oxygen-producing catalysts from Martian *Meteorites* by a robotic AI chemist[J]. *Nature Synthesis*, 2024, 3(3): 319–328.
- [99] 中国科学院上海硅酸盐研究所. MatMind: 材料科学与工程大模型[EB/OL]. (2025–04–07) [2025–12–01]. https://www.sic.cas.cn/xwzx/kydt/202504/t20250407_7589586.html.
- [100] Wang W Y, Yin J L, Chai Z X, et al. Big data-assisted digital twins for the smart design and manufacturing of advanced materials: From atoms to products[J]. *Journal of Materials Informatics*, 2022, 2(1): 1.

AI-powered smart design of ultra-high temperature high-entropy ceramics

TIAN Dexiang^{1,2}, LU Jiaqi^{1,2}, LI Peixuan^{1,2}, GAO Xingyu³, WANG William Yi^{1,2}, SONG Haifeng^{3*}, LI Jinshan^{1,2*}

1. China-Kazakhstan Belt and Road Joint Laboratory on Materials Genome Engineering and Intelligent Science, Northwestern Polytechnical University, Xi'an 710072, China
2. State Key Laboratory of Solidification Processing, Northwestern Polytechnical University, Xi'an 710072, China
3. Institute of Applied Physics and Computational Mathematics, Beijing 100094, China

Abstract Driven by the imperative demand for extreme-environment materials in strategic sectors—including aerospace, deep-sea exploration, and advanced nuclear energy—traditional material systems are approaching their physical limits under synergistic conditions of ultra-high temperatures, severe corrosion, and high stress. High-entropy ceramics (HECs), characterized by a extremely vast compositional space and exceptional stability in extreme environments, are regarded as a pivotal class of next-generation strategic materials. However, the traditional "trial-and-error" R&D paradigm is trapped by the vast compositional landscape in a "combinatorial explosion", rendering development cycles prolonged and inefficient. Consequently, the targeted and efficient design of HECs remains a critical bottleneck hindering engineering application. A novel paradigm is systematically analyzed for the intelligent design of ultra-high temperature ceramics (AI4UHTC). With ultra-high temperature HECs selected as representative materials, the deep integration of high-throughput computation and machine learning (ML) within this paradigm is examined. A fundamental shift in the R&D workflow—from "empirical trial-and-error" to a "knowledge-assisted, data-driven" framework—is thereby driven. The evolutionary logic of HEC design paradigms—progressing from empirical and knowledge-based approaches to data-driven and intelligent strategies—is systematically elucidated. Specifically, the robust capabilities of ML are highlighted regarding accurate synthesizability prediction, the design and optimization of critical properties (mechanical, thermal, and chemical), and multi-objective synergy, supported by concrete application cases. Concurrently, challenges currently confronting intelligent design are critically analyzed regarding data ecosystems, model interpretability, process integration, and the closure of the computation-experiment loop. Ultimately, the establishment of the "Data-Model-Knowledge-Wisdom" autonomous evolutionary pathway and the "AI Multi-Agent" system will efficiently advance software autonomy for the intelligent design of ultra-high-temperature high-entropy ceramics and realize typical application demonstrations of AI4UHTC.

Keywords high-entropy ceramics; intelligent design; machine learning; AI4UHTC ●



(责任编辑 魏来)