● 前沿进展 Research Progress ●

DOI:10.16410/j.issn1000-8365.2026.6080

机器学习在钢铁材料研究中的应用进展

陈文辉[1,2,3,4],叶心兰[1,2,3,4],张佳雪[1,2,3,4],张孟浩[1,2,3,4],张 闫[5],吴红星[1,2],
王维俊[6,7],支辉辉[1,2,3,4],王海丰[1,2]

(1. 西北工业大学 凝固技术全国重点实验室,陕西 西安 710072;2. 西北工业大学 先进润滑与密封材料研究中心,陕西 西安 710072;3. 西北工业大学 深圳研究院,深圳 518063;4. 西北工业大学 重庆科创中心,重庆 401135;5. 西北有色金属研究院,陕西 西安 710016;6. 中国科学院合肥物质科学研究院,安徽 合肥 230031;7. 合肥综合性国家科学中心能源研究院,安徽 合肥 230031)

摘 要:钢铁材料因力学性能优异、成分空间宽广而备受关注,但其成分-工艺-组织-性能关系复杂,传统方法难以高效解析。机器学习为此提供了新路径,却仍受数据质量、泛化性与物理一致性制约。本文围绕钢铁领域典型数据模态与任务,系统梳理机器学习方法流程,从显微组织分割、性能映射、层错能预测等关键问题切入,归纳各类方法的适用条件与局限,并剖析数据异构、评价标准不一、外推能力不足等核心挑战。综述表明,机器学习在钢铁性能预测与设计中潜力显著,但有效应用须依赖高质量数据范式、合理验证策略与物理知识融合。未来应强化跨模态数据整合、模型可解释性与工程可迁移性,推动"数据-知识协同驱动"的材料设计范式发展。

关键词:钢铁材料;机器学习;预测建模;材料设计;组织性能

中图分类号:TP181 **文献标识码**:A **文章编号**:1000-8365(2026)10-1079-20

Progress of Machine Learning Applications in Steel Research

CHEN Wenhui[1,2,3,4], YE Xinlan[1,2,3,4], ZHANG Jiaxue[1,2,3,4], ZHANG Menghao[1,2,3,4], ZHANG Yan[5], WU Hongxing[1,2], WANG Weijun[6,7], ZHI Huihui[1,2,3,4], WANG Haifeng[1,2]

(1. State Key Laboratory of Solidification Processing, Northwestern Polytechnical University, Xi'an 710072, China ; 2. Center of Advanced Lubrication and Seal Materials, Northwestern Polytechnical University, Xi'an 710072, China; 3. Research & Development Institute of Northwestern Polytechnical University in Shenzhen, Shenzhen 518063, China; 4. Innovation Center NPU Chongqing, Chongqing 401135, China; 5. Northwest Institute for Non-ferrous Metal Research, Xi'an 710016, China; 6. Hefei Institutes of Physical Science, Chinese Academy of Sciences, Hefei 230031, China; 7. Institute of Energy, Hefei Comprehensive National Science Center, Hefei 230031, China)

Abstract: Steel materials have attracted sustained attention because of their excellent mechanical properties and broad compositional design space; however, the intrinsic complexity of the composition-processing-microstructure-property relationships makes them difficult to efficiently resolve using traditional approaches. Machine learning offers a promising alternative, yet its application remains constrained by issues such as data quality, generalizability, and physical consistency. In this work, machine learning methods in steel research from the perspective of representative data modalities and task types were systematically reviewed. Focusing on key problems, including microstructure segmentation, property mapping, and stacking fault energy prediction, the applicability and limitations of different modelling paradigms were summarized.

收稿日期:2026-04-24

基金项目:新材料重大专项(2025ZD0619503);国家自然科学基金(52574452, 52201141);凝固技术全国重点实验室开放课题(2025-TS-03);广东省基础与应用基础研究基金(2021A1515110692);重庆市自然科学基金(cstc2021jcyj-msxmX1189);中央高校基本科研业务费专项资金(G2025KY05042);中国博士后科学基金面上项目(2021M702662)

作者简介:陈文辉,2004 年生,硕士生.研究方向为机器学习辅助设计特种钢的开发.Email: cwh2025@mail.nwpu.edu.cn

通信作者:支辉辉,1990 年生,博士,副教授.研究方向为极端环境服役用特种合金开发.Email: zhh@nwpu.edu.cn

张 闫,1994 年生,博士,工程师.研究方向为机器学习辅助特种合金开发.Email:ustbcw1201zy@163.com

吴红星,1990 年生,博士,副教授.研究方向为金属基超润滑材料与技术.Email:whxred@nwpu.edu.cn

引用格式:陈文辉,叶心兰,张佳雪,张孟浩,张闫,吴红星,王维俊,支辉辉,王海丰.机器学习在钢铁材料研究中的应用进展[J].铸造技术,2026,47(10):1079-1098.

CHEN W H, YE X L, ZHANG J X, ZHANG M H, ZHANG Y, WU H X, WANG W J, ZHI H H, WANG H F. Progress of machine learning applications in steel research[J]. Foundry Technology, 2026, 47(10): 1079-1098.

Furthermore, fundamental challenges were critically examined, such as data heterogeneity, inconsistent evaluation protocols, and limited extrapolation capability. This review indicates that while machine learning holds significant promise for accelerating property prediction and material design in steels, its effective deployment relies on high-quality data paradigms, rigorous validation strategies, and the integration of physical knowledge. Future efforts should emphasize cross-modal data integration, model interpretability, and engineering transferability, thereby advancing toward a "data-knowledge co-driven" paradigm for materials design.

Key words: steel materials; machine learning; predictive modelling; material design; microstructure and properties

钢铁是生产生活最常见最常用的金属材料，具有显著区别于其他材料的特点：铁元素分布范围广阔，其在地壳元素总量中的占比约为4.75%，铁矿熔炼技术简单，投入产出比优于多数其他金属，钢铁本身加工适配性强，回收利用的空间大[1-3]。依托这些优点，钢铁材料走进现代社会各类生产场景，用量远超其他金属结构材料，支撑起现代工业模式的整体架构，是工业运行不可缺少的基础支撑。当前，钢铁已经投入规模生产，应用范围覆盖基础设施、先进制造、新能源、交通、航空航天等多个国家重大战略与关键领域[4-8]。国家“十五五”(2026~2030年)规划要求钢铁工业将高质量发展作为贯穿规划研究全过程的主线，提出高端化、智能化、绿色化发展的方向目标和发展途径[9-11]。这为行业划定了研发重点，也通过更高的性能标准，引领钢铁材料实现强度与韧性的协同提升。

长期以来，材料的研究主要依托传统试错法[7-8, 12-14]。但随着现代钢材在成分、加工路径及微观结构调控等方面的日益复杂，试错法自身固有局限逐渐显现，其研发周期长、可探索范围受限，试错成本高[15-16]，因此建立全新的研究模式已非常迫切[17]。近年来，机器学习技术已经和多个科学领域结合，在应用方面展现出强大的开发空间[18-20]。在材料科学领域，机器学习可用于预测材料特性，开发新材料，梳理成分、组织与结构、性能之间关联[21-24]，可直接从数据中学习规律，从已有数据中梳理成分、工艺参数、微观结构、性能之间的关联[25-26]，充分利用数据信息。基于这一优势，机器学习能以远低于第一性原理计算或实际实验的成本，快速实现性能预测、成分筛选与微观结构的优化，提升材料设计效率[27-30]。

钢铁领域围绕显微组织表征、力学性能测试及成分工艺性能关联已进行大量实验工作，积累多来源的大量数据，支撑机器学习进行相关应用[31-34]。本文围绕显微组织识别、组织/成分工艺与性能映射、层错能预测这3个方面，梳理机器学习于钢铁材料研究中具有代表性的应用途径，并且分别从传统机器学习、深度学习、物理知识融合方法、大语言模型等不同的技术路线着手，剖析它们在数据需求、可解释性、泛化能力这些方面所存在的差异。基于此情况，着重探讨当前研究出现的数据异构性问题、评价标准不一致的状况、跨钢种外推能力不足的问题等关键挑战，从而为后续的研究提供具备更强可操作性的分析框架和发展方向。

1 机器学习的一般方法流程

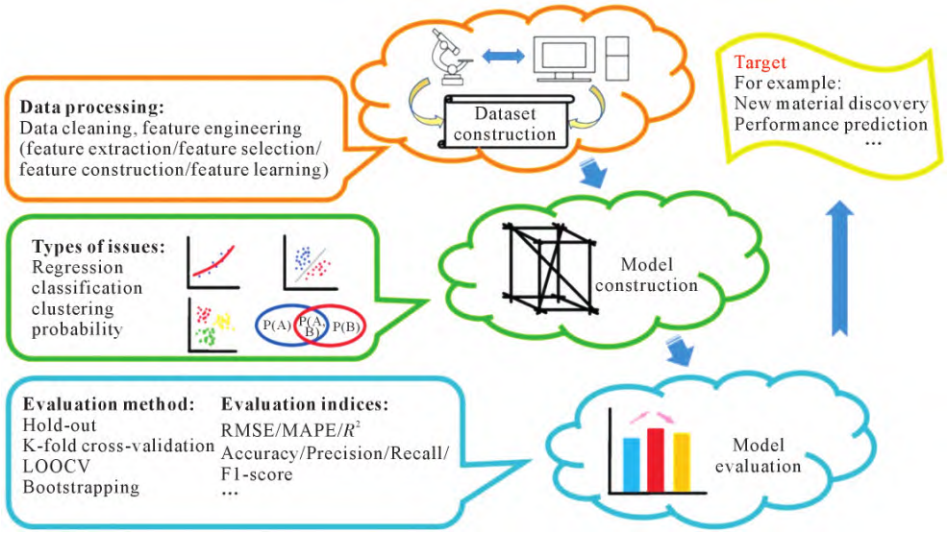
材料科学研究中，常规机器学习建模可分为3个步骤，如图1所示[34]。数据清洗、特征表达、模型选择、超参数优化是通用机器学习流程的重要组成部分，直接决定模型能否有效应用于钢铁领域的具体研究问题。

1.1 数据预处理与特征池构建

机器学习方法依托已有数据挖掘隐藏规律，其输出结果的可靠程度，由输入数据的质量决定。钢铁材料数据涉及化学成分、热处理工艺、显微组织表征、力学性能等多类信息，不同来源的数据在测试标准、记录形式和尺度方面常常存在差异。这让数据清洗不只是一项技术性的操作，还会直接对模型的可用性产生影响。为确保数据可用有效，需要识别处理数据中的不完整、错误或无关记录，通过替换、修正或删除等方式提高数据质量[35-36]，为后续的建模奠定可靠基础。

针对结构化成分与工艺数据，常用预处理包括单位统一、缺失值处理、异常值识别、特征尺度变换及标签一致性校验[37]。应统一温度、强度等变量的单位与表达，避免模型学习单位差异带来的伪相关；缺失数据可依据缺失比例和机制，选用删除、均值或中位数填补、K近邻填补、多重插补或模型填补；异常值可通过物理范围约束、3σ准则或四分位距法识别，但在钢铁数据中异常值可能反映特殊工艺或极端组织，需结合冶金知识判断处理方式[37-38]。对尺度敏感的模型常采用线性缩放法或标准差标准化；最后应对性能标签和物理条件进行一致性检查，避免混合物理含义不同的数据[39]。

对于显微组织图像数据，预处理重点在于图像质量控制、尺度统一和标注一致性，常用去噪、对比度增强、灰度归一化、尺度校准、裁剪及旋转翻转等



RMSE-Root-mean-square error; MAPE-mean absolute percentage error; R^2-correlation coefficient; LOOCV-leave-one-out cross-validation

图 1　机器学习应用于材料科学问题的一般流程[34]

Fig.1　General process of applying machine learning to material science problems[34]

数据增强操作[40]。由于光学显微镜、扫描电子显微镜和电子背散射衍射图像在亮度、对比度、分辨率和晶界清晰度等方面存在差异[41]，若缺乏规范化，模型可能学习为设备或制样的差异而非真实组织特征。合理的尺度校准和数据增强有助于提升模型泛化能力，降低过拟合风险[42]。

数据预处理主要从提高预测精度、增强稳定性和改善可迁移性3方面影响模型。降噪、纠错并结合物理冶金知识清洗数据，可减少模型对非物理关联的依赖，避免在同分布测试中表现良好而在新钢种或新工艺下失效。例如，Wang等[43]基于钢材成分与热处理参数预测力学性能时，通过数据清洗、相关性分析和特征筛选剔除冗余变量，提升了模型预测相关性并降低了平均绝对误差。Che等[44]在钢铁显微组织分类研究中，通过图像裁剪、尺度统一和数据增强扩充训练样本，提高了模型对复杂组织形貌的识别能力。上述结果表明，数据预处理不仅是建模前的基础步骤，也是影响模型准确性、稳健性和泛化能力的重要因素。

特征工程是指从清洗后的数据中挖掘和建立有效特征，提升模型的预测精度和可解释性[45]。传统机器学习方法通常依赖研究人员基于物理冶金知识构建特征，这一过程主要涵盖特征构建、特征提取与特征选择3个方面的内容。特征构建是指从原始的数据集中构建出新的特征；特征提取从原始的数据中借助变换、组合或分解等方法，提取更具代表性的新特征；特征选择指从原始特征集中筛选，最终得到最小特征子集，筛选过程要满足两个条件，保证模型泛化能力，不损害模型运行性能。常用的特征选择方法包括过滤法[46]、包裹法[47-48]、嵌入法[49]等。在这一过程中，研究人员往往会结合领域知识，从原始数据提取更丰富的信息，进而更加准确地表征潜在问题[50]。特征工程作为机器学习的基础步骤，能决定机器学习模型的有效性上限[51]。

1.2　预测模型的建立

完成数据集建立和特征工程处理后，下一步是建立机器学习模型，首先是根据任务需求选择合适的算法，现有常用的算法可根据图2完成分类。

算法的训练方式主要分为5类：①监督学习，应用广泛、模式成熟，用于各类预测任务；②无监督学习，从无标注数据中挖掘潜在结构，可完成聚类与降维；③半监督学习，介于监督学习和无监督学习之间，同时利用少量标注数据和大量未标注数据；④自监督学习，在标注数据不足时进行特征学习与表示，多用于自然语言处理；⑤强化学习，通过智能体与环境交互、不断试错来寻找最优策略，处理序贯决策问题。目前主要采用监督学习与无监督学习，下文将重点介绍。

监督学习领域常用算法大致可分为6类：线性模型、树模型及集成方法、K近邻(K-nearest neighbors, KNN)、核方法与间隔模型、概率模型，以及以循环神经网络(recurrent neural network, RNN)、卷积神经网络(convolutional neural network, CNN)和Transformer为代表的深度学习模型。线性回归及其正则化变体结构简单、可解释性强，适用于分析成分、热处理参数与力学性能之间的线性或近似线性关系，可用于关键变量筛选[52]。树模型及其集成方法在钢铁材料性能预测中应用广泛，其中随机森林通过集成多棵决策树降低过拟合风险，提高模型稳定性[53-54]。K近邻

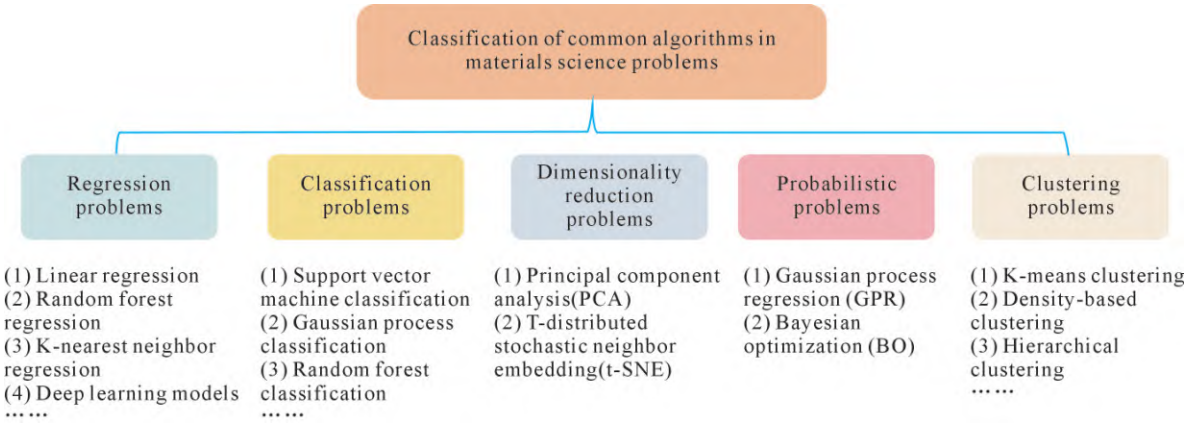


图 2 机器学习方法的常用算法

Fig.2 The common algorithms of machine learning methods

是一类直观的统计模式识别算法[55]，不预设数据分布，可用于分类和回归，但其表现受近邻数、距离度量和特征尺度影响[53]。支持向量机(support vector machine, SVM)适合处理中小样本和非线性问题，性能与核函数、惩罚参数及特征标准化密切相关[56]。高斯过程回归基于贝叶斯框架，可在给出预测值的同时提供不确定性估计[57]。当钢铁材料数据具有强非线性、高维度或跨模态特征时，深度学习模型展现出更强的特征表达能力。RNN及其变体适用于工艺参数、温度曲线和性能演化等时序数据建模，可捕捉过程变量间的动态关联[58-60]。CNN能够自动提取显微组织图像的空间特征，应用于图像分类分割、检测任务中得到广泛应用[61-64]。Transformer基于自注意力机制，可建模序列或多源信息中的长程关联[65]，目前在钢铁领域主要应用于工艺参数预测、成分/工艺、结构和性能间的建模、跨模态知识检索生成等方向[66-68]。

无监督学习在钢铁材料研究中主要用于数据结构发现、降维可视化、样本分群和特征表示学习。常见方法包括K均值聚类、基于密度的空间聚类应用与噪声算法(density-based spatial clustering of applications with noise, DBSCAN)、主成分分析(principal component analysis, PCA)、t分布随机邻域嵌入(t-distributed stochastic neighbor embedding, t-SNE)、局部线性嵌入(locally linear embedding, LLE)、均匀流形近似与投影(uniform manifold approximation and projection, UMAP)、自编码器(variational autoencoder, VAE)和生成对抗网络(generative adversarial network, GAN)等。聚类可识别不同成分体系、热处理状态或组织类型之间的潜在分组关系。Jain等[69]指出K均值适用于凸形簇，但对初始化、噪声和异常值敏感；Schubert等[70]指出DBSCAN能识别任意形状的簇并区分噪声，因此更适合复杂分布材料数据的聚类与异常识别。Jolliffe等[71]强调PCA适合用于高维成分、工艺和性能数据的降维压缩，并辅助筛选主要影响因素；t-SNE、LLE和UMAP等非线性降维方法常用于复杂数据与显微组织特征的可视化分析[72-74]。VAE可通过编码—解码过程学习低维潜在表示[75]，Kim等[76]利用VAE基于4 000张双相钢合成显微组织图像，构建了连续的三维潜空间并生成新显微组织。GAN通过生成器与判别器的对抗训练生成接近真实分布的样本[77]，Suzuki等[78]以GAN生成符合真实特征的双相钢微观结构，并利用低维潜变量空间大幅降低逆分析的搜索维度，加速探索高强高塑的最优微观结构。

需要指出的是，在实际钢铁材料机器学习研究中，完整的工作流程通常由数据预处理、特征构建、模型训练与对比、结果解释等多个环节协同构成，不同类型方法可在同一研究中配合使用。Wenzlick等[79]采用主成分分析和K均值聚类等无监督方法，对9%~12%Cr铁素体/马氏体钢和奥氏体不锈钢数据集进行异常样本识别。结果表明，识别异常样本有助于降低数据噪声、发现错误记录并避免模型过拟合，从而提升后续监督学习的预测可靠性，是无监督学习用于数据质量评估的重要预处理步骤。

在性能预测阶段，研究者常同时构建多种候选模型进行对比，而非预先假定某一种算法最优。常用模型包括线性回归、岭回归、随机森林、梯度提升树、支持向量机、高斯过程回归及神经网络等，通过交叉验证与独立测试集，结合平均绝对误差、均方根误差、决定系数等指标综合评估预测精度、稳定性和泛化能力，再根据模型复杂度、可解释性与实际需求选择最优模型。Li等[80]在预测铁素体/马氏体钢不同温度下的抗拉强度和伸长率时，比较了线性回归、多层感知机、支持向量回归、随机森林回归、核岭回归和极端梯度提升树等模型，结合随机森林与序贯前向

选择筛选关键特征，并采用沙普利值解释最优模型。结果表明，极端梯度提升树表现最优，且可揭示Ti、Y_2O_3、Cr、W及热处理温度等因素的影响，体现了模型对比、特征筛选与可解释性分析共同构成的完整研究闭环。Dinibutun等[81]在9%Cr钢极限抗拉强度预测中，同样经过数据准备、特征选择与多模型比较，评价了线性回归、随机森林和支持向量机，并利用斯皮尔曼秩相关系数分析元素影响，进一步印证了多模型对比对确定可靠预测方法的必要性。

1.3　模型评估与超参数优化

完成机器学习建模后，需要评估模型质量进行评估，调整模型参数。留出法属于常用评估方法，留出法将数据集分为训练集和测试集，实现简单、单次耗时短，但容易导致训练样本分布不均[82]。为克服该局限，常采用更稳定的交叉验证。K折交叉验证将数据均分为K份，轮流以1份测试、K-1份训练，取K次均值；留一法是K等于样本数的特例，适合小样本场景。

选定评估方法之后要通过相应指标来分析模型性能。处理分类问题时常用召回率、F1值、受试者工作特征曲线(receiver operating characteristic, ROC)、曲线下面积(area under ROC curve, AUC)。处理回归问题时，常用的评估指标包括均方误差(mean squared error, MSE)、均方根误差(root mean squared error, RMSE)、平均绝对误差(mean absolute error, MAE)、平均绝对百分比误差(mean absolute percentage error, MAPE)和决定系数(R-Squared, R^2)。处理图像问题时，常用的评估指标包括交互比(intersection over union, IoU)，平均交并比(mean intersection over union, mIoU)，Dice相似系数(dice similarity coefficient, DSC)。在钢铁材料研究中，单一精度指标往往不足以全面判断模型有效性。由于不同研究在数据规模、钢种类型、特征形式以及训练测试划分方式上存在差异，文献中报告的R^2、MAE或IoU等指标通常难以直接横向比较。同时，在同分布测试集上表现良好的模型，也未必能推广到新钢种、新工艺窗口或新的显微组织状态[83-84]。所以，钢铁机器学习模型评估不仅要关注拟合精度，还应考虑数据类别不平衡、跨模式验证、物理规律一致性、工程约束下的稳健性和可迁移性。

当模型评估结果未达到预期时，可通过超参数优化提升性能。传统优化方法如梯度下降、牛顿法、共轭梯度法和启发式算法等，对算法理解要求较高，且在大规模、非凸或不可微问题中存在局限。超参数优化(hyperparameter optimization, HPO)为此提供了有效途径[85]。一般而言，主流的HPO方法可分为3类：①基于搜索的策略，主要包括网格搜索(grid search, GS)和随机搜索(random search, RS)；②贝叶斯优化(bayesian optimization, BO)；③基于种群的元启发式算法，如遗传算法(genetic algorithm, GA)与粒子群优化(particle swarm optimization, PSO)。网格搜索是按照指定步长遍历所有的超参数组合，计算可靠但成本高[86]；随机搜索通过随机采样降低成本，通常能较快找到较优解。贝叶斯优化利用代理模型描述超参数与性能之间的关系，可在较少评估次数下逼近较优解，在高维空间中可能受限[87]。遗传算法和粒子群优化通过群体迭代搜索增强全局探索能力，但收敛速度相对较慢，需要合理设置控制参数[88]。

2　机器学习在钢铁材料研究中的典型应用

本文围绕显微组织识别、组织/成分工艺与性能映射以及层错能预测方面，梳理机器学习在钢铁材料研究中的代表性应用，并从传统机器学习、深度学

表 1 模型评估方法的优势与劣势

Tab.1 Advantages and disadvantages of model evaluation methods

Method	Advantages	Disadvantages
Holdout method	Simple and straightforward to implement, with high computational efficiency. Model validation can be completed through a single partitioning of the dataset.	The stability of evaluation results is relatively poor, as they are highly dependent on the specific data splitting strategy. In addition, the utilization efficiency of available data is relatively low.
K-fold cross-validation	Each sample is utilized for both training and validation, enabling a better balance between bias and variance. It improves data utilization efficiency while maintaining a reasonable computational cost.	Compared with the holdout method, it requires higher computational resources. Moreover, due to the influence of random data partitioning, evaluation results may still exhibit certain fluctuations.
Leave-one-out cross-validation (LOOCV)	The partitioning scheme closely approximates the distribution of the original dataset, providing highly reliable evaluation results. It maximizes data utilization by allowing each sample to be independently used for validation.	Extremely computationally intensive, as the model must be trained N times (where N represents the total number of samples). Therefore, it is unsuitable for large-scale datasets.

习、物理知识融合方法及大语言模型等技术路线出发，对其在数据需求、可解释性与泛化能力等方面的差异进行分析，如表2所示。已有研究表明，传统机器学习方法在中小样本、结构化特征较明确的材料数据建模中通常具有较好的稳定性与可解释性[89-90]；深度学习在处理复杂显微组织图像、多模态表征数据及高维非线性映射问题时表现出更强的特征提取能力，但往往依赖更大规模的数据与更高的训练成本[91-93]。Batra等[94]指出仅依赖统计相关性的模型在可解释性与外推性方面存在根本局限。物理知识融合方法通过引入物理约束、机理特征或先验规律，可有效提升模型的外推能力与结果可信度；Batra等[25]也强调，物理先验与机理知识有助于增强材料机器学习模型的鲁棒性与实际可用性。大语言模型方面，Tian等[95]的工作显示其在材料文本知识抽取、文献辅助分析和跨任务迁移中展现出潜力，但在钢铁材料专用任务中的可靠性与可验证性仍有待深入研究；Dis等[96]也指出大语言模型输出存在不稳定性，科学应用中必须加强验证，不能直接替代专业判断。

2.1 相分割识别

显微组织识别是构建钢铁材料组织–性能模型的基础环节。相分割识别将依赖于人工经验判断的相组成、形貌及分布信息，转化为标准化的机器分割。相较于传统人工分析方法，机器学习能够在一定程度上提高识别效率与一致性[97]。Müller等[98]指出钢铁显微组织识别研究大体可分为两类：一类是基于人工定义特征与传统机器学习的相识别方法，另一类是基于深度学习的端到端识别与分割方法。前者更强调物理冶金知识与可解释特征的结合，后者则更依赖数据驱动的多尺度特征自动提取。不同方法在样本规模、标注成本、组织复杂度和跨条件泛化能力方面具有不同适用边界。

2.1.1 基于人工定义特征与传统机器学习的相识别

人工特征相识别方法通常依照物理冶金知识，从显微组织图像中提取形态、纹理和亚结构等统计特征，结合支持向量机、随机森林等分类器完成识别。这类方法的优势在于特征具有明确的物理含义，可解释性强，且在小样本下稳定性较好；但特征表达能力有限，当组织形貌复杂或存在多尺度结构时，人工特征往往难以全面捕捉关键差异。已有研究通过提取晶粒尺寸、长宽比、圆度、面积分数、灰度共生矩阵、局部二值模式和多尺度纹理等特征，实现了典型组织的有效识别[99-101]，表明在图像采集条件相对统一、组织差异明确且特征设计充分时，传统方法能够获得较高精度。这类结果通常依赖特定的图像获取与处理流程，其在跨实验条件或跨钢种场景中的适用性还有待进一步验证。

Gola等[100]开发了一种基于支持向量机的分类模型。马氏体、贝氏体、珠光体的形成机制不同，可利用其在形状、尺寸、内部纹理及亚结构分布等方面的显著差异，构建支持向量机分类模型。如图3a所示，研究收集6张光学显微镜(light optical microscope, LOM) 图像与144张原始扫描电子显微镜(scanning electron microscope, SEM)图像，再从微观图像中分别预标定出3类组织区域，共收集马氏体样本4 108个、贝氏体5 691个、珠光体1 292个，样本覆盖面广且

表 2 钢铁材料机器学习典型研究任务的比较框架

Tab.2 Comparative framework of representative machine learning tasks in steel research

Research task	Primary data modalities	Data requirements	Key advantages	Major limitations
Microstructure segmentation and recognition	Optical microscopy, scanning electron microscopy (SEM), and electron backscatter diffraction (EBSD) images	Medium to high (requires annotated datasets)	Enables direct quantitative characterization of microstructural morphology and supports subsequent modeling and analysis	High annotation costs; limited model generalizability across different imaging instruments and processing conditions
Microstructure-property prediction	Statistical microstructural descriptors or microstructural images	Low to medium/ medium to high	Establishes quantitative relationships between microstructures and mechanical properties, such as strength and ductility	Prone to overfitting under small-data conditions; image-based models generally suffer from limited interpretability
Composition/processing-property prediction	Structured compositional, heat-treatment, and processing parameters	Medium	Suitable for composition screening and optimization of processing windows	Highly sensitive to data standardization and extrapolation validation
Stacking fault energy (SFE) prediction	Composition, temperature, density functional theory (DFT)-based data, and thermodynamics-derived features	Low to medium/ high-fidelity data are scarce	Facilitates failure mechanism identification and performance prediction	Significant discrepancies among SFE labels from different data sources; requires strict adherence to physical consistency

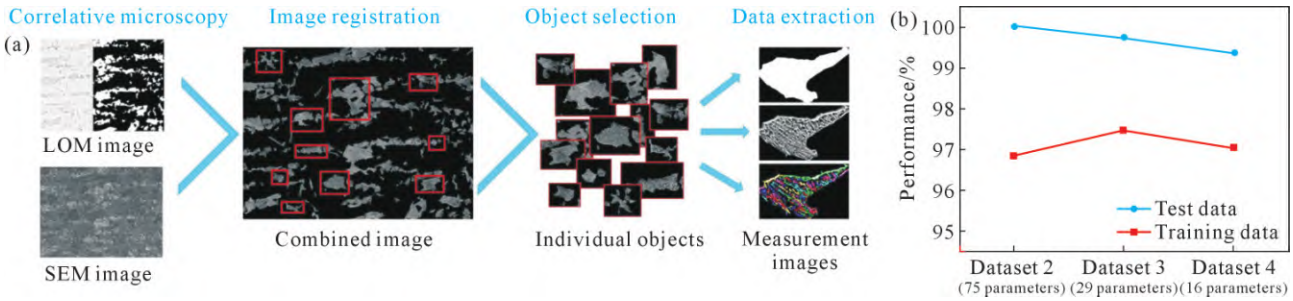


图 3　低碳钢微观组织自动分类的数据采集流程与模型性能评估：(a) 用于获取数据挖掘分类所需数据的不同方法步骤–从 LOM/SEM 成像、图像配准、目标物提取，到形态、纹理与亚结构参数的量化；(b) 不同数据集训练与测试准确率的可视化结果–基于 75 个参数的数据集 2、基于 29 个参数的数据集 3 以及基于 16 个参数的数据集 4[100]

Fig.3　Data acquisition pipeline and model performance evaluation for automatic microstructure classification of low-carbon steels: (a) steps of the different methods used to obtain the data for the data mining classification-from LOM/SEM imaging, image registration, and object selection to quantification of morphological, textural, and substructural parameters; (b) visualization of test and training accuracy of the different datasets-dataset 2 based on 75 parameters, dataset 3 based on 29 parameters, and dataset 4 based on 16 parameters[100]

数量充足。研究通过图像配准技术，将同一组织的LOM图像与SEM图像对齐，分别提取宏观形态与微观纹理特征，实现了“一对象双图像”的多模态数据支撑。在此基础上，构建了包含形态、纹理及亚结构在内的75个特征，并通过相关系数与基于遗传算法的进化特征选择筛选出16个特征。如图3b所示，利用16个特征，构建基于径向基函数核的SVM多分类模型，结合5折交叉验证完成超参数优化，模型在独立测试集上的最终分类总体准确率达97.04%。

除Gola等[100]的工作外，其他传统机器学习相识别研究也从不同角度表明了人工特征方法在钢铁显微组织识别中的有效性。Chowdhury等[102]比较了多种特征提取、特征选择与传统分类器组合，表明支持向量机、近邻和随机森林等方法均可用于显微组织图像分类。而Müller等[103]进一步利用基于灰度共生矩阵的经典纹理特征集和多尺度局部二值模式特征，结合支持向量机区分珠光体、粒状贝氏体、退化上贝氏体、上贝氏体、下贝氏体和马氏体等形貌相近组织，说明多尺度纹理特征能够增强复杂组织的判别能力。Tsutsui等[104]采用灰度共生矩阵纹理特征和随机森林、梯度提升机识别多类钢铁显微组织，并通过重要特征分析讨论了不同成像条件下的特征差异。这些工作共同表明，传统机器学习方法在钢铁显微组织识别中具有良好的可解释性与工程实用性，尤其适合样本量有限、组织类别明确、图像采集条件相对稳定的任务。

2.1.2　基于深度学习的相识别

与人工特征方法不同，深度学习模型能够直接从原始显微图像里学习多尺度表征，降低对人工特征设计的依赖程度，在复杂组织形貌、相界模糊的情形下展现出更强的表达能力。现有研究主要采用卷积神经网络、全卷积网络、U型全卷积语义分割网络(U-Net)等方法，实现显微组织分类、相区域分割、晶粒检测、缺陷识别和组织参数定量化[44, 62-63, 105- 106]。

Che等[44]提出一种基于CNN实例分割模型的微观组织智能化表征方法。研究仅选取20 张SEM双相不锈钢原始微观图像，先裁剪得到320 张包含完整组织特征的子图，再通过旋转、加噪、对比度调整等数据增强策略将数据集扩增至2 240 张，对铁素体相进行多边形像素级标注。该方法引入数据集预训练权重开展学习，可同步实现晶粒的目标检测、分类与像素级轮廓分割。结果表明，模型在全置信度区间内保持了优异的分类性能，测试集F1分数稳定达0.95(图4a)，精确率与召回率均稳定维持在0.94以上的高水平(图4b和c)，精确率–召回率(P-R)曲线进一步验证了模型极强的分类能力与泛化性能(图4d)；基于模型分割结果，铁素体/奥氏体体积分数预测平均误差仅0.9%，平均晶粒尺寸预测误差仅0.07 μm，可精准复现热处理温度对双相钢相比例与晶粒尺寸的调控规律。

除Che等[44]的研究外，其他深度学习工作也从不同层面拓展了钢铁显微组织识别的应用。Azimi等[41]采用全卷积神经网络实现低碳钢显微组织的像素级分割与分类，将特征提取和分类判别统一为端到端框架。Muñoz-Rodenas等[107]和Ivo等[108]引入迁移学习，利用预训练网络降低对大规模标注数据的依赖。在像素级相识别方面，Muñoz-Rodenas等[109]使用U-Net等分割低碳钢中的珠光体与铁素体，Swain等[110]则利用U-Net 考察不同放大倍数和钢种下复杂相钢的分割效果。此外，Shen等[111]通过分割双相钢中马氏体和铁素体并定量相分数与晶粒尺寸。这些研究表明，深度学习方法在钢铁显微组织分析中的价值不仅体现在识别精度提升，更在于能够与组织定量化和工艺优化形成连续的数据链条。

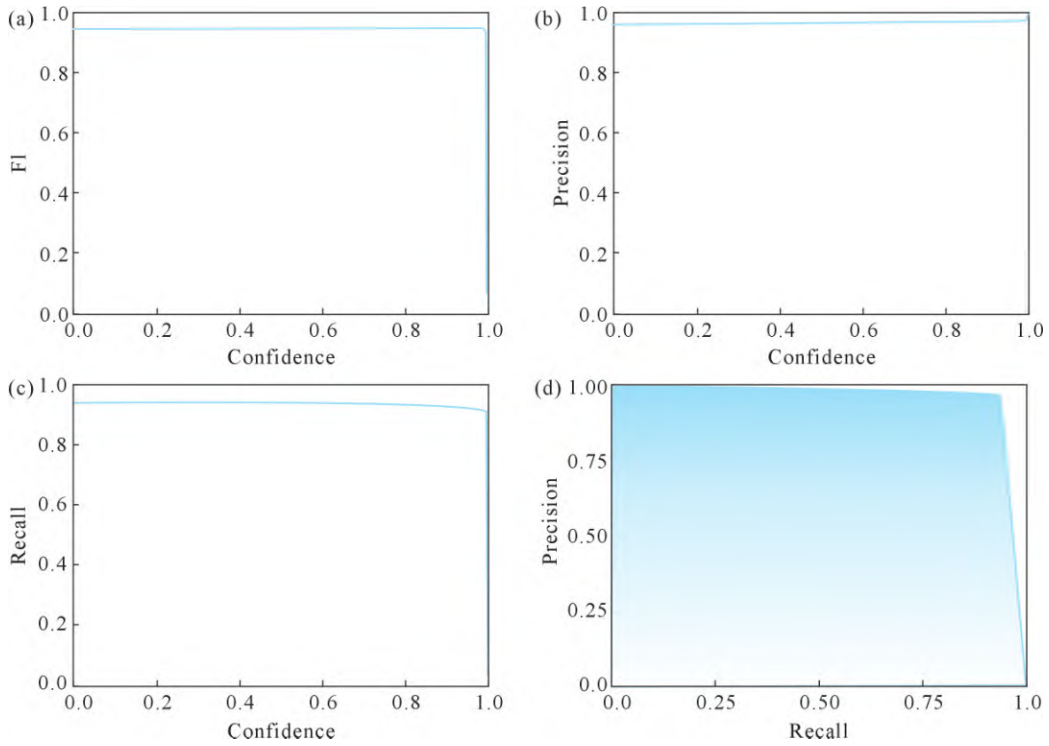


图 4 双相钢组织分割模型的分类性能评估曲线：(a) 模型的 F1 分数曲线；(b) 精确率曲线；(c) 召回率曲线(横坐标为置信度，代表模型对铁素体预测结果的置信程度)；(d) 精确率–召回率(P-R)曲线[44]

Fig.4 Classification performance evaluation curves for microstructure segmentation models of dual-phase steels: (a) F1 score of the proposed model; (b) precision curve; (c) recall curve(confidence refers to the model's certainty in predicting the ferrite results); (d) precision-recall (P-R) curve[44]

2.2 微观组织特征与力学性能关系

钢铁材料力学性能的形成与其微观组织密切相关。可利用统计组织特征、显微组织图像，实现对强度、塑性及强韧匹配等关键性能的高效预测[112-114]。按照输入数据形式的不同，相关研究大概能分成基于统计组织特征的方法、基于显微组织图像的方法，这两种方法在数据需求、可解释性有着明显不同。

2.2.1 基于微观组织统计特征的力学性能预测

在基于微观组织统计特征预测力学性能的研究中，输入特征通常包括各相体积分数、晶粒尺寸、相分布、取向信息、形貌参数以及由电子背散射衍射或图像分析获得的统计描述符。本质上，这类方法是对复杂显微组织进行低维统计表征，再利用线性回归、人工神经网络、随机森林、梯度提升树或支持向量机等模型建立组织—性能映射关系。该类方法具有物理意义明确、变量可控性强的优势，便于定量分析不同组织参数对力学性能的独立作用及耦合影响。因此该类方法适合作为机理分析、变量筛选和工艺优化的辅助工具。

Jung等[112]对多边形铁素体(polygonal ferrite, PF)、针状铁素体(acicular ferrite, AF)、粒状贝氏体(granular bainite, GB)、贝氏体铁素体(bainitic ferrite, BF)、马氏体(martensite, M)5类微观组织完成形貌标定，并提取各类组织的体积分数，作为模型输入特征。研究先采用线性回归分析各组织组分对力学性能的独立调控效应，流程如图5a所示，该模型输入量分别为PF、AF、GB、BF和M的体积分数。每一个输入变量对应一个权重系数，各变量与对应权重相乘后求和，得到最终计算净值，净值再与实验测量结果对比，并在反向传播过程中对权重系数进行迭代更新，缩小预测数值与实验数值之间的误差。硬相GB和BF对屈服强度贡献显著，软相PF贡献最弱；M作为第二相易成为位错形核位点，降低屈服强度，但在少量存在时对抗拉强度贡献为正；屈强比主要受软相比例调控，M影响最弱。然而，线性模型难以刻画多因素耦合的非线性调控机制。作者构建了深度人工神经网络，如图5b所示，以5类组织分数为输入，经多层隐藏层与梯度下降优化，同时输出屈服强度(yield strength, YS)、抗拉强度(tensile strength, TS)和屈服比(yield ratio, YR)。模型验证集MAPE为6.59%，测试集为10.78%，验证了深度神经网络在捕捉微观组织特征和力学性能之间的非线性关系的有效。

除Jung等[112]的工作外，其他研究也进一步验证了该路线的有效性。Lee等[115]以高强低碳贝氏体钢中多边形铁素体、针状铁素体、粒状贝氏体和贝氏体铁素体等组织组分的体积分数为输入，预测屈服强

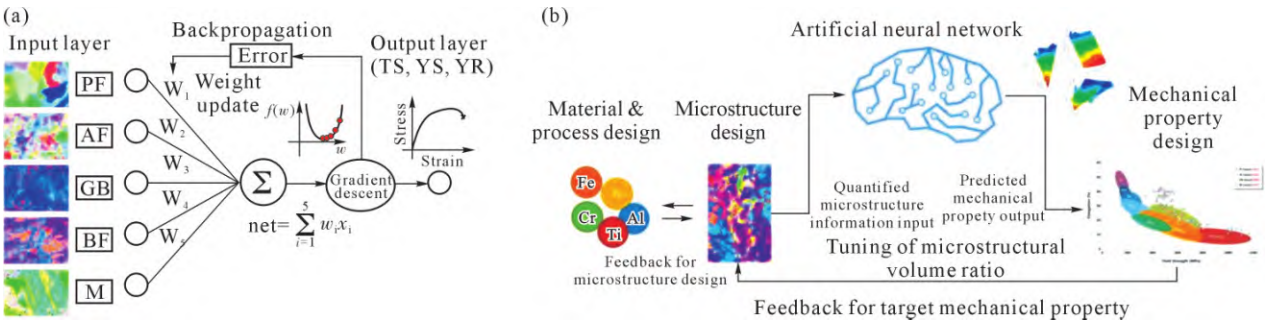


图 5　基于微观组织体积分数的高强度钢拉伸性能预测模型与闭环设计框架：(a) 输入为 PF、AF、GB、BF、M 相体积分数，输出为抗拉强度(TS)、屈服强度(YS)、屈强比(YR)，通过反向传播与梯度下降算法训练；(b) 基于 ANN 的材料–微观结构–力学性能闭环设计–从成分/工艺到性能预测与反馈优化[112]

Fig.5　Prediction model and closed-loop design framework for tensile properties of high-strength steels based on volume fractions of microstructural constituents: (a) input comprising volume fractions of PF, AF, GB, BF and M phases for prediction of TS, Y and YR trained via backpropagation and gradient descent; (b) ANN-based closed-loop design of material-microstructure-mechanical properties-from composition/processing to property prediction and feedback optimization[112]

度、屈强比和均匀延伸率，并通过相对重要性分析评估各组分对性能的影响，结果表明深度人工神经网络模型精度优于多元线性回归。Yu等[116]则基于EBSD获取的晶界密度(低角度晶界、高角度晶界、Σ3晶界)、组织边界密度(原奥氏体晶界、板条束界、块界、亚块界)和平均几何必需位错密度等多参数特征，利用随机森林、梯度提升树等预测低合金钢的屈服强度与抗拉强度，进一步表明此类EBSD特征可用于组织—性能建模。总体而言，基于统计组织特征的方法能在较小数据规模下建立可解释性较强的组织—性能模型，尤其适合分析相分数、晶粒尺寸、组织组分比例等关键变量对力学性能的影响，并可借助特征重要性、敏感性分析等方法增强结果解释性。然而，这类特征本质上是对复杂组织结构的低维压缩，难以充分表达相间空间分布、局部连通性、组织梯度和多尺度形貌差异。因此，在局部异质性突出或空间分布效应显著的钢铁材料中，仅依赖有限统计特征可能难以全面反映微观组织对性能的综合作用。

2.2.2　基于显微组织图像的力学性能预测

基于显微组织图像的方法直接以相图、带衬度图或重构组织图像为输入，利用深度学习自动学习尺寸、形貌、相分布、取向及空间结构等信息，减少了对人工定义参数的依赖，更适合描述复杂组织形貌对性能的综合影响。Zhang等[117]针对激光粉末床熔融316L不锈钢，提出深度学习直接从金相图像预测拉伸强度和显微硬度，R^2分别达0.96和0.91，展现了图像驱动模型在增材制造钢铁材料中的预测能力。Suzuki等[78]进一步将GAN与CNN结合，用GAN生成双相钢微观组织，用CNN预测最大应力与工作极限应变，并在低维潜变量空间中搜索目标性能对应的最优组织，体现了图像模型在逆向设计和工艺优化中的潜力。

Ren等[114]提出了一种基于CNN的显微组织图像的力学性能预测框架。研究以EBSD获取的带衬度(band contrast, BC)图像作为输入，经过裁剪、旋转等一系列操作，将6 组原始样品扩增成了1 152 张标准化图像，进而建立小样本数据集。所建立的CNN模型无需人工定义马氏体体积分数、晶粒尺寸等特征，能够自动从图像中学习尺寸、形状、分布、衬度等完整微观信息结果显示，模型针对屈服强度、抗拉强度和总伸长率测试集的预测MAE分别是6.8、16.4 MPa 和0.60%(图6a~c)，预测精度相较于传统物理模型提高将近1/2。研究进一步运用梯度加权类激活映射(gradient-weighted class activation mapping, Grad-CAM)来实现逆向可视化，图6d~g热力图表明强度预测热点集中在马氏体区域，塑性预测热点集中在铁素体区域，这与物理冶金机制完全吻合。

不同的方法并没有绝对的优劣之分。在小样本、侧重机理解释、变量可控的场景中，基于组织统计特征的传统方法仍然有着显著优势，这是由于其输入变量有着清晰的物理意义，有利于分离出各组织参数的独立作用、耦合影响。在数据规模扩大、组织复杂度提高、显微信息难以被少量统计量全面概括时，图像驱动的深度学习方法更具潜力。但这两类研究里报道的精度不能进行简单的横向比较：统计特征模型常处理较小且更具结构化的数据集，而图像模型更容易受到样本扩增策略、图像采集条件、训练或测试划分方式的影响。所以，组织—性能建模未来更值得关注的方向并非单纯追求更高指标，而是怎样在保持可解释性的同时提高对新组织状态和新钢种模式的泛化能力。

2.3　成分工艺与力学性能关系

钢铁材料的关键力学性能，是成分设计和加工工艺共同作用的产物。在实际工程应用中，直接建

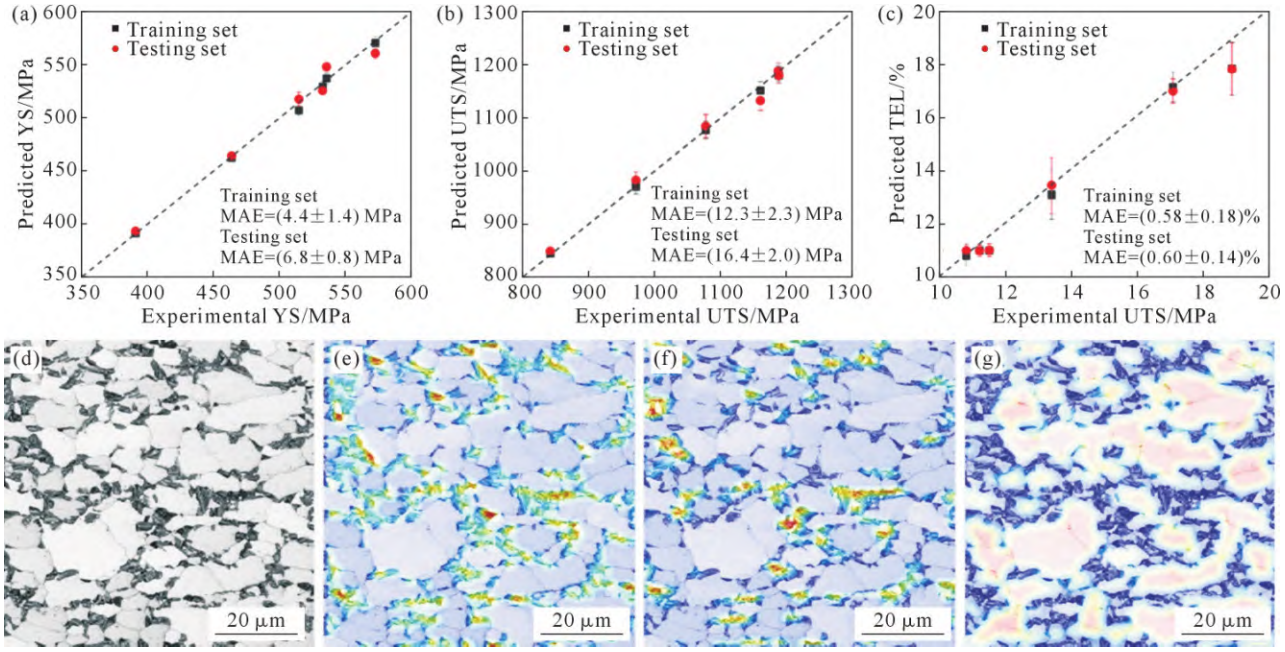


图 6 双相钢拉伸性能预测结果与特征可视化：(a~c) CNN 模型训练集与测试集的屈服强度、抗拉强度、总伸长率预测值与实验值对；(d) 双相钢样品的 EBSD 带衬度 BC 图；(e~g) 对应屈服强度、抗拉强度、总伸长率预测的 Grad-CAM 热力图。图中颜色深浅表征微观区域对性能预测的贡献度，暖色调（红/黄）代表高贡献度区域，冷色调（蓝/紫）代表低贡献度区域[113]

Fig.6 Prediction results of tensile properties and feature visualization for dual-phase steels: (a~c) predicted vs. experimental yield strength, ultimate tensile strength and total elongation for the training and testing sets of the CNN model; (d) EBSD band contrast (BC) map of the DP steel sample; (e~g) the corresponding Grad-CAM heatmaps for the YS, UTS, and TEL predictions. The color depth in the heatmaps indicates the contribution weight of each microscopic region; warm colors (red/yellow) represent high-contribution regions, and cold colors (blue/purple) represent low-contribution regions[113]

立成分、热处理过程与机械性能之间的关系能够大幅缩短研究周期[38, 43, 95, 118]，提高成分筛选和工艺优化效率。

2.3.1 基于结构化成分与工艺特征的力学性能预测

基于结构化成分与工艺参数的性能预测通常以合金元素含量、热处理温度、保温时间、冷却速率、变形量、轧制温度、回火温度等数值变量作为输入，再结合特征筛选、超参数优化和模型解释方法建立统计或机器学习模型。本质上，这类方法是在有限的成分—工艺空间内拟合输入变量与力学性能之间的映射关系。其优势在于输入变量定义清晰、物理含义明确，便于分析关键合金元素和工艺参数对性能的影响规律；不足在于模型性能高度依赖特征工程质量和数据覆盖范围，当存在多源异构数据、复杂非线性耦合或外推预测需求时，其表达能力和可靠性可能受到限制。

Wang等[43]选取元素成分和热处理参数当作初始特征，开发了高斯过程回归模型，用来预测钢材的抗拉强度、屈服强度、总延伸率。图7a展示了这项工作的整体框架，首先完成数据的收集与清洗工作，之后针对支持向量机、人工神经网络、高斯过程回归等6种算法展开预训练筛选，确定高斯过程回归为最优基础模型。接着通过相关性分析与相对平均影响值剔除冗余特征，构建仅含9 个关键变量的简化模型，并结合贝叶斯优化完成超参数调优。性能对比结果(图7b和c所示)表明：特征筛选后模型精度提升，关键特征模型对UTS、YS、TEL的预测相关系数(pearson correlation coefficient, R)均高于全特征模型，同时MAE降低，验证了简化特征集在减少噪声、提升泛化能力上的优势。

除Wang等[43]的工作外，其他研究也从不同钢种、性能指标和建模策略的角度，证实了基于结构化成分与工艺特征预测力学性能的有效性。Xiong等[119]基于碳钢和低合金钢数据，比较了随机森林、K近邻、人工神经网络和符号回归等模型，发现随机森林在疲劳强度、抗拉强度、断裂强度和硬度预测中表现较优，且特征分析指出回火温度及C、Cr、Mo等元素是关键影响变量。也有研究将物理知识或优化算法引入结构化特征模型中。Jiang等[120]针对珠光体钢丝拉拔过程样本量有限的问题，将热力学、动力学和有限元计算结果转化为微观组织相关特征，再结合机器学习预测抗拉强度，体现了物理计算与数据驱动融合的优势。

2.3.2 基于文本挖掘与大语言模型的力学性能预测

数据驱动方法发展迅速，这使得科研界对基于大语言模型即LLM的钢铁材料研究框架给予了广泛关注。此类方法借助挖掘大规模材料领域语料库，突破了结构化数据集的局限，能够自动提取成分与

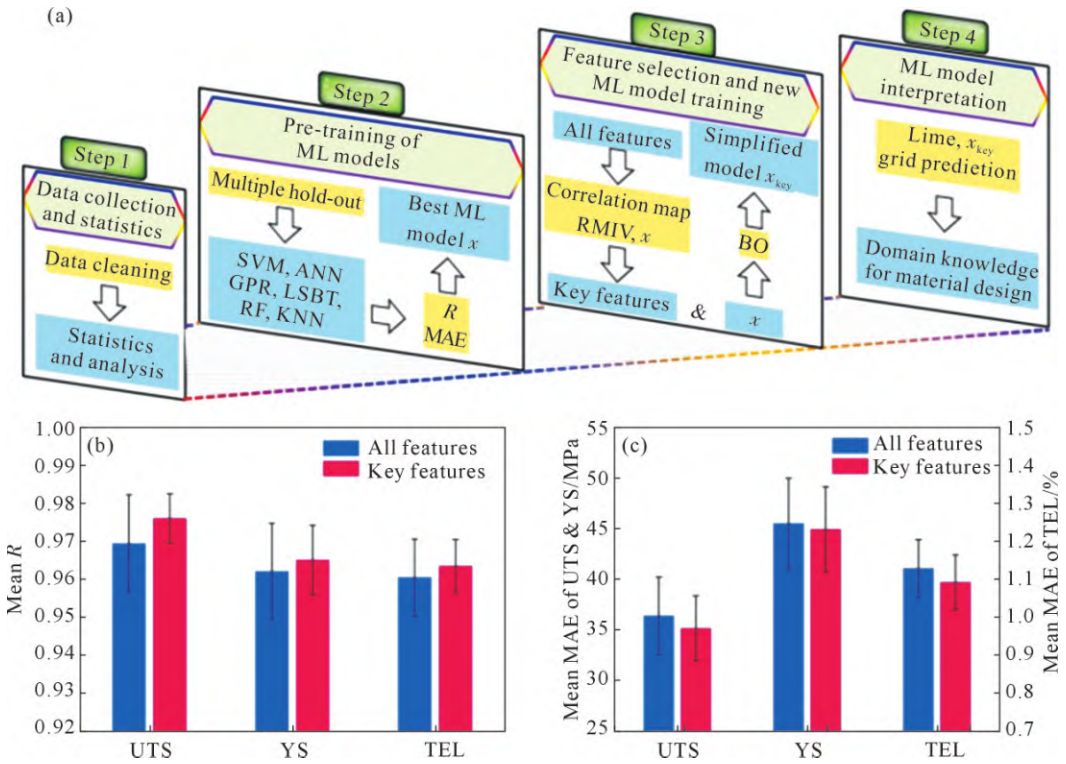


图 7　调质钢机器学习建模流程与特征优化性能对比：(a) 模型训练与优化流程图，涵盖数据清洗、多模型预筛选、特征选择及模型解释 4 阶段；(b) 全特征与关键特征模型对 UTS、YS、TEL 的预测相关性 R 对比；(c) 两种模型对应的 MAE 对比[43]

Fig.7　Machine learning modelling pipeline and performance comparison of feature optimization for quenched and tempered steels: (a) flowchart of model training and optimization, covering data cleaning, multimodel preselection, feature selection, and model interpretation; (b) comparison of R for UTS, YS, and TEL between full-feature and key-feature models; (c) comparison of MAE between the two models[43]

工艺方面的信息，还能学习其中隐含的语义关联，以此来实现材料性能的预测。基于LLM的方法为解析复杂的成分、工艺、性能之间的关联提供了灵活性更高的研究方法。

Tian等[95]提出了一种大语言模型框架，用来从材料科学文本中预测钢材的力学性能并指导新材料设计。研究构建了覆盖420万篇材料摘要与5.5万篇钢铁全文的专业语料库(图8a)，从中系统提取了多品类钢材的成分、核心制备工艺(图8d)与力学性能数据，数据分布均符合冶金学基本规律(图8b和c)。团队所开发的用于钢铁领域的专用模型SteelBERT，是以DeBERTa架构为基础进行搭建的。依靠上述提到的专业语料，通过掩码语言建模任务来完成自监督预训练。同时还定制了钢铁领域的专属分词器，能够比较精准地达成钢铁成分与制备工艺文本的上下文感知表征；该模型在18种新型钢材上表现出良好的泛化能力，其预测屈服强度、抗拉强度与伸长率的预测值与实验真实值高度吻合(图8e~g)，在18 种新型钢材上三项性能的R^2均超 78%。该模型经过64组15Cr奥氏体不锈钢实验数据微调后，成功指导了冷轧与回火工艺的优化，制备出高性能实验钢，其强塑综合性能远远超过已报道的同类材料(图8h)。

然而从实际应用方面来考虑，依据结构化成分、工艺描述符建立的模型，依旧是当前可靠性程度最高且最容易实现实际应用的解决办法，特别是在变量定义清晰明确、数据比较稀缺的场景之中。虽然基于大语言模型的方法减少了对人工建立数据库的依赖，在知识整合、跨任务迁移、逆向设计等方面呈现出一定优势，但是其目前存在的局限性也不容忽视：对高质量语料和术语规范的高度依赖[121-122]、可解释性欠缺[123]、易生成看似合理但与事实不符的输出[124-125]，还有跨场景应用时稳定性和可靠性依然有限等问题[126-127]。所以，其在钢铁材料研究中的应用尽管具备明显潜力，不过现阶段仍旧应当被视作一种尚在发展的辅助研究工具，而非完全成熟的通用解决方案。

2.4　层错能预测

层错能(stacking fault energy, SFE)是决定奥氏体钢变形机制与组织演化路径的关键物理参数，对孪生、相变及加工硬化行为具有决定性影响。然而，该参数难以通过常规实验直接测量，而传统的第一性原理等计算方法又面临成本高、适用范围有限的问题。为提高层错能预测效率，研究者从特征输入角度建立成分或者成分温度预测层错能、第一性原理和机器学习结合辅助计算以及融合热力学知识的迁

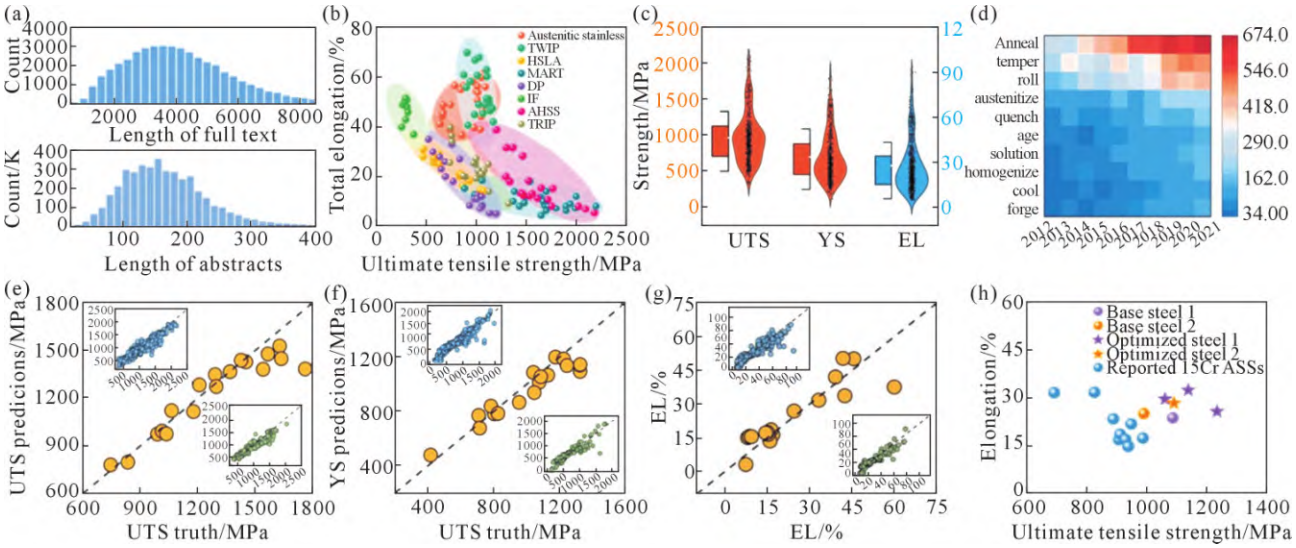


图 8 研究数据集统计、模型力学性能预测能力及新型钢材优化效果的综合表征：(a) 钢铁领域预训练语料库中全文与摘要的文本长度分布直方图；(b) 不同类型钢材的抗拉强度与总伸长率阿什比图；(c) 钢材三项核心力学性能 —— 抗拉强度、屈服强度与延伸率的统计分布小提琴图；(d) 2012~2021 年钢材制备关键工艺动作的出现频次热力图；(e~g) 分别为模型对 UTS、YS、EL 的预测值与实验实测值的拟合散点图(内嵌子图为训练集与验证集的拟合结果)；(h) 优化后 15Cr 奥氏体不锈钢、基体钢与已报道 15Cr 奥氏体不锈钢(ASSs)的抗拉强度–伸长率性能对比散点图[95]

Fig.8 Comprehensive characterization of the research dataset statistics, mechanical property prediction capability of the model, and optimization effect of the novel steel: (a) histogram of the length distribution of full texts and abstracts in the pretrained steel corpus; (b) Ashby plot of the ultimate tensile strength and total elongation for various types of steel; (c) violin plots of the statistical distributions of the three core mechanical properties-ultimate tensile strength, yield strength, and elongation; (d) heatmap of the occurrence frequency of key steel fabrication process actions from 2012 to 2021; (e~g) scatter plots of the model-predicted values versus the experimental true values for UTS, YS and EL, respectively (insets show the results of the training dataset and validation dataset); (h) scatter plot of ultimate tensile strength versus elongation for the optimized 15Cr austenitic stainless steels, base steels, and reported 15Cr austenitic stainless steels (ASSs)[95]

移学习预测层错能等策略。

2.4.1 基于成分与温度特征的层错能快速预测

依据成分或成分—温度特征的层错能预测办法常要依靠实验或者文献数据，建立化学成分、温度与层错能数值或者区间之间的映射联系。这类办法适宜用于大规模成分筛选、变形机制的初步判别。然而，不同文献里层错能数据在测试条件、计算方法方面差异明显，其标签自身有着较强离散性。虽借助区间分类能够在一定程度上减少这种影响，可不同合金模式之间的临界区间依然可能出现偏移。所以，这类方法更适合用于趋势分析，在高精度预测方面存在一定局限性

在成分预测方面，Chaudhary等[128]研究以奥氏体钢的变形机制为依据，如图9a所示，不同文献报道的SFE临界值存在显著离散性，基于以往研究，将SFE归纳为3个稳定区间：SFE<20 mJ/m^{2}为低区间，对应相变诱发塑性(transformation-induced plasticity, TRIP)行为；20~45 mJ/m^{2}为中区间，对应孪生诱发塑性(twinning-induced plasticity, TWIP)行为；SFE>45 mJ/m^{2}为高区间，对应位错滑移行为。实验或计算测得的SFE数据存在离散性，但区间分类本身具有稳定性，可抵抗这种离散性的影响。整合文献500余组奥氏体钢实验数据，构建了化学成分与SFE区间的分类模型。图9b呈现降维后的数据分布，PCA将9 维成分数据降至3维并保留大部分方差信息；LLE则捕捉到非线性结构，数据呈现清晰的Y形分布，可区分高、中、低SFE区域。C、N等间隙元素影响显著，微量波动即可改变SFE区间。模型选用并对比随机森林、支持向量机、人工神经网络，最终采用随机森林模型，分类准确率约85%。验证结果表明，该模型可准确预测明确成分的变形机制区间，对过渡成分给出模糊判断，无跨类别严重误判，适用于奥氏体钢成分设计与变形机制预测。

Wang等[129]比较了热力学模型与机器学习模型在300余组奥氏体钢SFE数据上的预测能力，结果表明集成机器学习模型相较经验模型具有更稳定的预测表现。Liu等[130]基于文献实测SFE数据建立了成分驱动的可解释机器学习模型，并通过特征筛选和沙普利值分析揭示关键元素对SFE的影响规律。这些研究共同表明，成分或成分—温度特征能够为奥氏体钢SFE快速预测和变形机制初步筛选提供有效工具。

2.4.2 第一性原理与机器学习耦合的层错能计算

为兼顾预测精度与计算效率，研究者进一步展开尝试，把第一性原理计算和机器学习方法结合起来。这类方法是基于密度泛函理论所获取的高精度能量数据，借助机器学习模型学习原子结构和能量

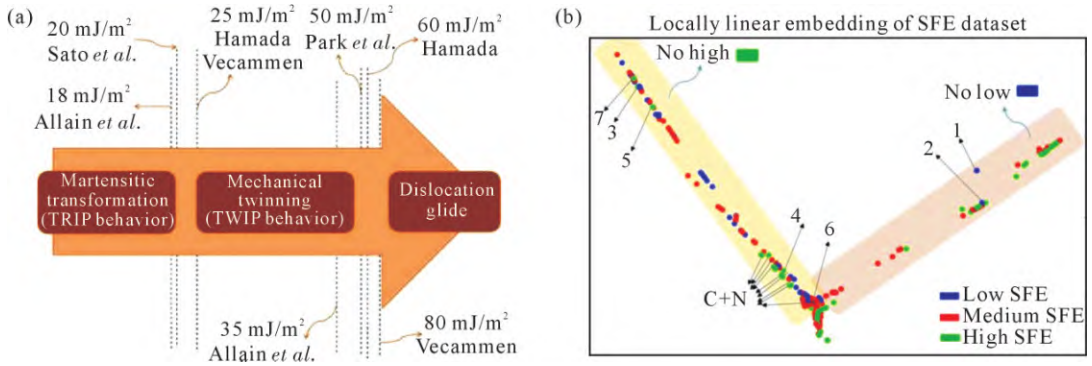


图 9　奥氏体钢 SFE 变形机制区间与 LLE 可视化：(a) 文献中不同报道的层错能区间临界值；(b) SFE 数据集的 LLE 可视化，颜色标记 SFE 类别[128]

Fig.9　SFE-dependent deformation mechanism regimes and LLE visualization for austenitic steels: (a) different values in the literature for SFE regimes; (b) LLE visualization of the SFE dataset, with SFE categories color-coded[128]

之间的非线性关系，以此在保证理论严谨的情况下，达成更高效的层错能预测。

已有研究从不同角度展示了这种结合路线的可行性。Arora等[131]针对复杂合金中小尺寸原子模型导致SFE波动较大的问题，提出利用机器学习学习近邻原子环境与SFE之间的关系，从而降低多组元合金SFE预测中的统计波动。该研究表明，机器学习可以在较小原子模型与更大尺度随机固溶体之间建立桥接关系，从而降低逐一计算大量构型的成本。Linda等[132]进一步将从头算电子结构计算与机器学习结合，用于加速广义层错能曲线预测，说明基于第一性原理特征的代理模型可用于快速筛选具有目标变形行为的金属和合金体系。

在钢铁体系中，Samanta等[133]的研究是第一性原理与机器学习结合计算SFE的代表性案例。该办法首先通过密度泛函理论(density functional theory, DFT)计算了含有堆垛层错晶体的模式能量，梳理Al、Mn溶质原子距离层错不同原子层的时候能量的变化规律(图10a)。进而建立起了模型训练的基础数据集，接着利用自动化机器学习工具DeepHyper建立起原子局域结构和模式总能量的映射关系，借助自适应实验设计达成了任意成分、原子构型的能量快速预测，模型经过两轮迭代就能筛选出低能原子构型(图10b)。最终依据层错能的物理定义，将机器学习预测的含层错构型与完美晶体构型的能量差值除以层错面积，得到目标体系的层错能，实现了低成本、高通量的SFE预测。

2.4.3　融合热力学知识的层错能预测

在数据量相对有限的情形下，融合了热力学知识的迁移学习方法借助引入自由能差、相变驱动力等中间变量，以此来提高模型对于材料本征机制的刻画水平与能力。从物理本质上看，SFE与奥氏体相稳定性、面心立方(face-centered cubic, FCC)与密排六方(hexagonal close-packed, HCP)相自由能差、温度及晶粒尺寸等因素密切相关。融合热力学知识的SFE预测方法是在单纯成分驱动模型基础上的进一步发展。

Curtze等[134]采用修正Olson-Cohen模型，对Fe-Cr-

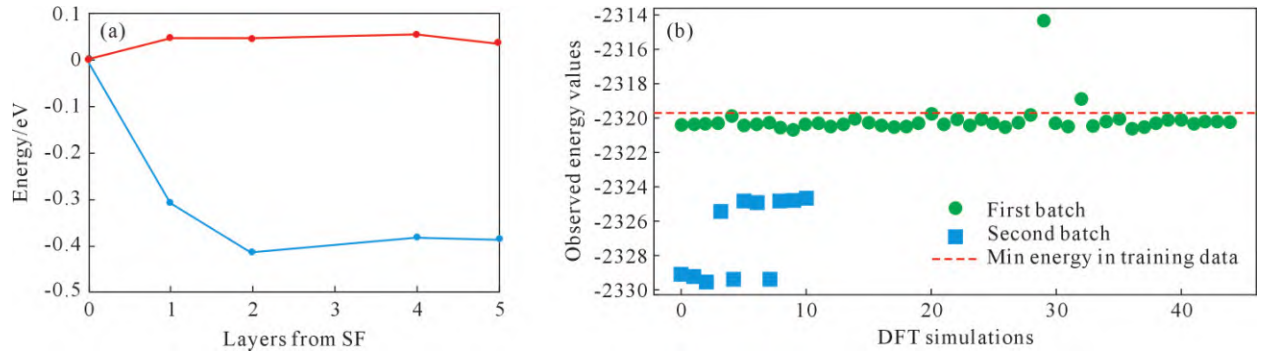


图 10　溶质原子的能量分布特征与机器学习模型的自适应迭代验证：(a) 铁基体中掺杂原子位于距堆垛层错不同 (111) 原子层时，体系相对于掺杂原子位于层错处的总能量变化(红色为 Mn 原子，蓝色为 Al 原子)；(b) 基于 DeepHyper 的自适应实验设计结果，展示两批次 DFT 模拟得到的体系实测能量值(红色虚线为训练集中的最低能量值)[133]

Fig.10　Energy distribution of solute atoms and adaptive iterative validation of the machine learning model: (a) variations in total energies of the system with a dopant atom placed at different (111) layers from the stacking fault in iron, with reference to the system with the dopant atom located at the SF (red line for Mn atom, blue line for Al atom); (b) adaptive experimental design results based on DeepHyper, showing the observed energy values of the system from two batches of DFT simulations (the red dashed line represents the minimum energy in the training dataset)[133]

Ni-Mn-Al-Si-Cu-C-N奥氏体钢体系的SFE进行了热力学建模，说明FCC/HCP相自由能差等热力学量可用于描述奥氏体钢层错形成。Zambrano等[135]则基于亚正规溶液热力学模型计算Fe-Mn-Al-C-Si钢的SFE，并构建了考虑成分、温度和晶粒尺寸变化的SFE图谱，表明热力学模型能够为高锰钢和奥氏体钢的成分设计与变形机制判断提供依据。在此基础上，研究者逐步将热力学知识与机器学习方法相结合，以提升模型的预测精度和物理一致性。Wang等[129]则基于300余组奥氏体钢SFE数据，比较了热力学模型、经验模型和机器学习模型的预测能力，指出热力学建模与机器学习方法在SFE预测中具有互补关系，即前者提供物理基础，后者能够提高复杂成分空间中的拟合能力和预测效率。

在上述研究基础上，Song等[136]提出一种借助迁移学习融合物理冶金参数的有效策略。研究整合188组高质量实验数据、对应的相变驱动力、FCC相吉布斯自由能、HCP相吉布斯自由能等参数，还在合理成分范围内生成6 000组虚拟样本用于CNN模型训练。对比直接输入特征、在全连接层嵌入物理冶金参数、迁移学习这3种参数融合策略后发觉，迁移学习方法表现最佳。直接输入特征指将合金成分与热力学参数共同作为模型输入；在全连接层中嵌入热力学参数指将相关参数引入卷积神经网络的全连接层；迁移学习方法的核心在于，首先构建以合金成分为输入、热力学参数为输出的高精度源模型，随后冻结该源模型的底层特征提取网络，将其作为预训练特征提取器复用，仅针对堆垛层错能预测任务对上层网络进行微调，从而实现物理冶金知识向堆垛层错能预测任务的迁移与复用。如图11所示，以相变驱动力作为迁移源时模型性能最优，其在独立验证集上的R^2达到78.5%，并且显著提升了低SFE区间的预测精度。

综合来看，融合热力学知识的SFE预测方法在纯数据驱动模型与物理冶金模型之间建立了桥梁。该方法不仅弥补了纯成分模型对相稳定性和相变驱动力表征的不足，也为小样本下钢铁层错能预测提供了更具机制约束的建模路径。

审视当下研究，SFE预测形成了3类比较清晰的技术路线：经验或实验数据映射、第一性原理与机器学习相结合、融合热力学知识的迁移学习。第一种实现简便，适用于快速筛选、变形机制区间判别，后两种在提高精度和物理一致性方面具有更大优势，特别适合用于高精度预测与机理研究。该方向的发展趋势显示，钢铁领域的机器学习正从单纯的数据拟合向与物理冶金知识深度融合的建模模式转变。

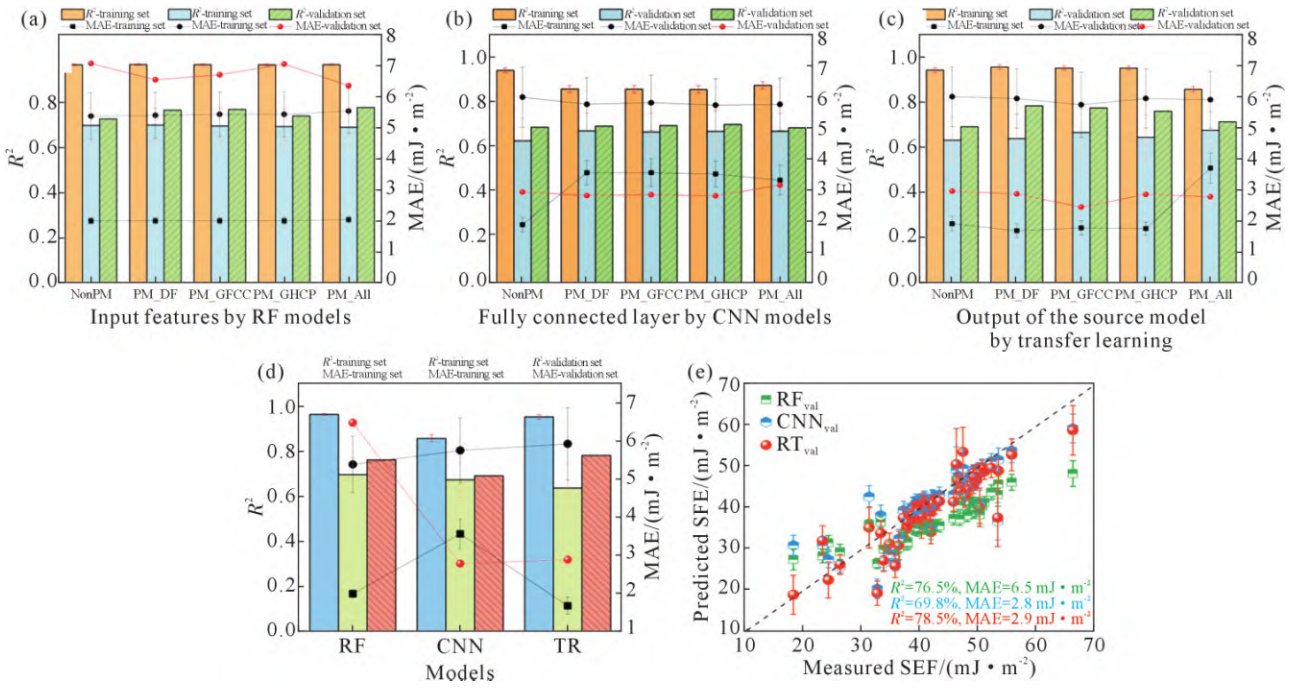


图 11 不同 PM 参数引入方式下 SFE 预测模型性能对比及预测值–实测值散点图：(a) 直接输入 PM 参数的 RF 模型性能；(b) 全连接层嵌入 PM 参数的 CNN 模型性能；(c) 以源模型输出为特征的 TR 模型性能；(d) RF、CNN 与 TR 模型最优性能对比；(e) 最优模型预测 SFE 与实测 SFE 的散点图及对应 R^2、MAE 指标[136]

Fig.11 Performance comparison of SFE prediction models with different PM parameter integration strategies and scatter plot of predicted vs. measured SFE: (a) RF models with direct PM parameter input; (b) CNN models with PM parameters embedded in fully connected layers; (c) TR models using source model outputs as features; (d) optimal performance comparison among the RF, CNN, and TR models; (e) predicted vs. measured SFE values with corresponding R^2 and MAE metrics[136]

3　总结与展望

3.1　总结

(1)当将机器学习应用到钢铁材料研究领域时，逐渐形成一条相对清晰的应用主线。这条主线包含多个方向，如显微组织识别、探寻组织成分工艺与性能之间的映射关系，还有对关键物理冶金问题进行建模研究等。这些方向都呈现出了比较可观的研究潜力、应用价值。

(2)在显微组织识别这一领域，基于人工特征的传统机器学习方法具备比较显著的可解释性，能够适用于小样本、特征清晰明确的场景，而深度学习方法在面对复杂的组织形貌、模糊的相界、多模态表征等条件时，展现出了更为高效的自动化水平和识别能力。

(3)在组织与性能、成分工艺与性能的建模领域，结构化特征模型在样本数量有限的情况下，展现出更为稳定、解释性更佳的特性。

(4)从钢铁材料机器学习研究整体趋势来讲，该研究正从单一数据源建模朝着多源多模态融合方向发展，从性能预测朝着设计优化方向拓展，从“数据驱动”更进一步迈向“数据—知识协同驱动”。

(5)机器学习可在一定程度上提高钢铁材料研究、设计的效率，然而模型预测结果还得结合实验验证和机理分析来判断。

(6)未来评价钢铁机器学习工作的关键，不应仅在于测试集上所取得的高指标，还涵盖了对于新钢种、新工艺窗口的外推能力、与物理规律的符合程度及在工程场景中的可部署性。

3.2　展望

(1)在钢铁机器学习的研究领域内，数据质量、标准化依旧是最为主要的限制因素。当下所拥有的数据通常源自不一样的实验平台、文献报道、生产过程，经常会出现测试标准未能保持统一、标签定义存在差异、工艺路径记录不够完整、缺失值数量较多等一系列问题。在未来，除了要建立面向钢种、工艺区间、组织类型的标准化数据库之外，还需要同步记录样品制备路径、表征设备、测试标准、数据清洗规则、不确定性信息，以此让数据拥有可追溯性、可复用性。

(2)在钢铁研究领域中，小样本、类别不均衡问题突出。新钢种、具有特殊组织状态的样本以及处于极端性能区间的样本，通常情况下非常稀缺，易致使模型在少数类别或者新的区域出现失效的情况。未来优先发展将迁移学习、主动学习、数据增强、物理先验约束结合在一起的策略，并且结合小样本实验设计来提高关键区域的数据获取效率。相较于单纯地扩大样本数量而言，提高样本覆盖的代表性更为关键，特别是针对新成分模式、新工艺窗口建立外部测试集，以此来真实地评估模型的外推能力。

(3)模型的可解释性、物理一致性方面，仍然有必要进一步予以强化。特别是针对深度学习、大语言模型而言，它们的预测过程常常欠缺透明度，这对其在工程设计领域的推广形成了限制。在未来，应当强化可解释性方面的分析工作，并且把热力学、相变动力学、物理冶金规律融入到建模的过程当中，以此推动机器学习模型从仅仅“可用”朝着更加“可信”的方向发展。

(4)从预测走向闭环设计将是未来的重要发展方向。当前已有研究在性能预测、工艺优化、逆向设计等方面展现出了潜力，然而距离切实达成“成分—工艺—组织—性能”闭环协同设计依旧存在着差距。未来需要进一步去推动机器学习与实验验证、高通量计算、材料设计平台的协同集成。

参考文献：

[1] EVANS H E. Newhigh-strength stainless steels[J]. Nature, 1972, 235: 219-220.

[2] SU B H, LU W J, GAULT B, DING R, MAINENI S K, WAN D, WU C H, CHEN H, PONGE D, RAABE D. Chemical heterogeneity enhances hydrogen resistance in high-strength steels[J]. Nature Materials, 2021, 20: 1629-1634.

[3] BHADESHIA H K D H. Prevention of hydrogen embrittlement in steels[J]. ISIJ International, 2016, 56(1): 24-36.

[4] 李昌鹏，庞建超，王子龙，李云杰，李琳琳. 2 GPa 超高强中锰钢中的夹杂物对其高周疲劳性能的影响 [J]. 材料研究学报，2025, 39(12): 892-900.
LI C P, PANG J C, WANG Z L, LI Y J, LI L L. Effect of size and distribution of inclusions on high-cycle fatigue properties of a 2 GPa-graded ultra-high-strength medium-Mn steel[J]. Chinese Journal of Materials Research, 2025, 39(12): 892-900.

[5] 刘炫业，刘屹，汪净，肖大恒，贾蕴航，李春雨，李云杰，袁国，王国栋. 回火时间对2 300 MPa屈服强度应变-时效中锰钢组织性能的影响[J]. 材料研究学报，2026, 40(1): 31-38.
LIU X Y, LIU Y, WANG J, XIAO D H, JIA Y H, LI C Y, LI Y J, YUAN G, WANG G D. Influence of tempering duration on microstructural evolution and mechanical behavior of strain-aged medium-manganese steel with 2 300 MPa yield strength[J]. Chinese Journal of Materials Research, 2026, 40(1): 31-38.

[6] 张孟浩，支辉辉，王维俊，罗皎，王海丰. 疲劳损伤奥氏体304不锈钢组织与性能的关联性[J]. 铸造技术，2025, 46(5): 458-463.
ZHANG M H, ZHI H H, WANG W J, LUO J, WANG H F. Correlation between the microstructure and properties of fatigue-damaged austenitic 304 stainless steel[J]. Foundry Technology, 2025, 46(5): 458-463.

[7] ZHI H H, LI J S, LI W M, ELKOT M, ANTONOV S, ZHANG H,

LAI M J. Simultaneously enhancing strength-ductility synergy and strain hardenability via Si-alloying in medium-AlFeMnAlC lightweight steels[J]. Acta Materialia, 2023, 245: 118611.

[8] ZHANG M H, ZHI H H, WANG R Z, YE X L, LI X Y, XU Z H, WANG W J, WANG H F, SU Y J. An ultrastrong and ductile duplex lightweight steel with dual-nanoprecipitation[J]. Crystals, 2025, 15(12): 1019.

[9] **李冉，张宝帅，管琪，于菲. “双碳”背景下我国钢铁行业绿色化智能化发展路径研究**[J]. **信息技术与标准化**，2024(10): 96-98.
LI R, ZHANG B S, GUAN Q, YU F. Research on green and intelligent development of steel industry under the back ground of “Dual Carbon” [J]. Information Technology & Standardization, 2024(10): 96-98.

[10] **朱立光. 以新质生产力推动钢铁产业高端化、智能化、绿色化发展**[J]. **河北冶金**，2024(6): 1-9.
ZHU L G. Promoting the high-end, intelligent and green development of the steel industry with new quality productivity[J]. Hebei Metallurgy, 2024(6): 1-9.

[11] **孟令茹，李福民，刘小杰，张智峰，李欣，吕庆. 高炉炼铁智能化的研究现状与展望**[J]. **冶金自动化**，2023, 47(2): 27-35.
MENG L R, LI F M, LIU X J, ZHANG Z F, LI X, LYU Q. Research status and prospect of intelligent ironmaking in blast furnace[J]. Matellurgical Industry Automation, 2023, 47(2): 27-35.

[12] YU H, FU J B, WANG C C, CHEN Y P, WANG L Y, FANG H X, LI J G, VAN DER ZWAAG S, XU W. Robust additive manufacturable Ni superalloys designed by the integrated optimization of local elemental segregation and cracking susceptibility criteria[J]. Acta Materialia, 2024, 266: 119658.

[13] LI H, ZHAO X M, ZHANG H L, LI D Z, LI J. Effect of the oxide layer structure on the decarburization behavior of 60Si2Mn spring steel in dry air: Experimental and first-principle study[J]. Materials Characterization, 2023, 196: 112651.

[14] XU X Y, HUANG C P, WANG H Y, LI Y Z, HUANG M. Rate-dependent transition of dislocation mechanisms in a magnesium alloy[J]. Acta Materialia, 2024, 263: 119474.

[15] CHEN M Y, FU C L, OKABE R, CHOTRATTANAPITUK A, BOONKIRD A, HUNG N T, LI M D. Artificial intelligence-driven approaches for materials design and discovery[J]. Nature Materials, 2026, 25(2): 174-190.

[16] FU H D, ZHANG H T, WANG C S, YONG W, XIE J X. Recent progress in the machine learning-assisted rational design of alloys [J]. International Journal of Minerals, Metallurgy and Materials, 2022, 29(4): 635-644.

[17] DURODOLA J F. Machine learning for design, phase transformation and mechanical properties of alloys[J]. Progress in Materials Science, 2022, 123: 100797.

[18] SURESH R, BISHNOI H, KUKLIN A V, PARIKH A, MOLOKEEV M, HARINARAYANAN R, GHARAT S, HINA P. Revolutionizing physics: A comprehensive survey of machine learning applications[J]. Frontiers in Physics, 2024, 12: 1322162.

[19] CARLEO G, CIRAC I, CRANMER K, DAUDET L, SCHULD M, TISHBY N, VOGT-MARANTO L, ZDEBOROVÁ L. Machine learning and the physical sciences[J]. Reviews of Modern Physics, 2019, 91(4): 045002.

[20] JORDAN M I, MITCHELL T M. Machine learning: Trends, perspectives, and prospects[J]. Science, 2015, 349(6245): 255-260.

[21] ALGHADEER M, AISYAH N D, HEZAM M, ALQAHTANI S M, BALOCH A A B, ALHARBI F H. Machine learning prediction of materials properties from chemical composition: Status and prospects[J]. Chemical Physics Reviews, 2024, 5(4): 041313.

[22] FU Z Y, LIU W Y, HUANG C, MEI T. A review of performance prediction based on machine learning in materials science[J]. Nanomaterials, 2022, 12(17): 2957.

[23] HUANG G N, GUO Y N, CHEN Y, NIE Z W. Application of machine learning in material synthesis and property prediction[J]. Materials, 2023, 16(17): 5977.

[24] YUAN J H, LI Z, YANG Y J, YIN A Y, LI W J, SUN D, WANG Q. Applications of machine learning method in high-performance materials design: A review[J]. Journal of Materials Informatics, 2024, 4(3): 14.

[25] BUTLER K T, DAVIES D W, CARTWEIGHT H, ISAYEV, WALSH A. Machine learning for molecular and materials science[J]. Nature, 2018, 559(7715): 547-555.

[26] RAHMAN A, HOSSAIN M S, SIDDIQUE A B. Review: Machine learning approaches for diverse alloy systems[J]. Journal of Materials Science, 2025, 60(29): 12189-12221.

[27] CHEN H, HE Z P, GE M L, CHE L, ZHENG K Y, SI T Y, ZHAO F. Composition design and optimization of Fe-C-Mn-Al steel based on machine learning[J]. Physical Chemistry Chemical Physics, 2024, 26(10): 8219-8227.

[28] ZHOU X Z, XU J J, MENG L, WANG W S, ZHANG N, JIANG L. Machine-learning-assisted composition design for high-yield-strength TWIP steel[J]. Metals, 2024, 14(8): 952.

[29] WANG Z L, ADACHI Y. Property prediction and properties-to-microstructure inverse analysis of steels by a machine-learning approach[J]. Materials Science and Engineering: A, 2019, 744: 661-670.

[30] PAN H J, TAO W Y, ZHANG S H, YAN K T, SUN Z, LIU L. Strategy for predicting microstructure of medium manganese steel based on deep learning method[J]. Applied Materials Today, 2024, 39: 102255.

[31] WANG B B, SONG Y, WANG J. A deep learning model for the accurate prediction of the microstructure performance of hot rolled steel[J]. International Journal of Manufacturing Research, 2021, 16 (3): 262-279.

[32] **王海伟，叶波，冯晶，种晓宇. 机器学习在钢铁材料研究中的应用综述**[J]. **中国材料进展**，2023, 42(10): 806-813.
WANG H W, YE B, FENG J, ZHONG X Y. Application of machine learning in steel materials: A survey[J]. Materials China, 2023, 42(10): 806-813.

[33] PAN G F, WANG F Y, SHAN C L, WU H H, WU G L, GAO J H, WANG S Z, GAO Z J, ZHOU X Y, MAO X P. Advances in machine learning- and artificial intelligence-assisted material design of steels[J]. International Journal of Minerals, Metallurgy and Materials, 2023, 30(6): 1003-1024.

[34] FANG W, HUANG J X, PENG T X, LONG Y, YIN F X. Machine learning-based performance predictions for steels considering manufacturing process parameters: a review[J]. Journal of Iron and

Steel Research International, 2024, 31(7): 1555-1581.

[35] WU S M. A review on coarse warranty data and analysis[J]. Reliability Engineering & System Safety, 2013, 114: 1-11.

[36] HU M W, TAN Q Y, KNIBBE R, XU M, JIANG B, WANG S, LI X, ZHANG M X. Recent applications of machine learning in alloy design: A review [J]. Materials Science and Engineering: R: Reports, 2023, 155: 100746.

[37] LEE J W, PARK C, LEE B D, PARK J, GOO N H, SOHN K S. A machine-learning-based alloy design platform that enables both forward and inverse predictions for thermo-mechanically controlled processed (TMCP) steel alloys[J]. Scientific Reports, 2021, 11(1): 11012.

[38] MILLNER G, MÜCKE M, ROMANER L, SCHEIBER D. Machine learning mechanical properties of steel sheets from an industrial production route[J]. Materialia, 2023, 30: 101810.

[39] OTTOMANO F, DE FELICE G, GUSEV V V, SPARKS T D. Not as simple as we thought: A rigorous examination of data aggregation in materials informatics [J]. Digital Discovery, 2024, 3 (2): 337-346.

[40] MA J C, HUC F, ZHOU P, JIN F F, WANG X, HUANG H Y. Review of image augmentation used in deep learning-based material microscopic image segmentation [J]. Applied Sciences, 2023, 13 (11): 6478.

[41] AZIMI S M, BRITZ D, ENGSTLER M, FRITZ M, MÜCKLICH F. Advanced steel microstructural classification by deep learning methods[J]. Scientific Reports, 2018, 8(1): 2128.

[42] STUCKNER J, HARDER B, SMITH T M. Microstructure segmentation with deep learning encoders pre-trained on a large microscopy dataset[J]. npj Computational Materials, 2022, 8(1): 200.

[43] WANG S, LI J, ZUO X W, CHEN N L, RONG Y H. An optimized machine-learning model for mechanical properties prediction and domain knowledge clarification in quenched and tempered steels [J]. Journal of Materials Research and Technology, 2023, 24: 3352-3362.

[44] CHE L, HE Z P, ZHENG K Y, XU X T, ZHAO F. An automatic segmentation and quantification method for austenite and ferrite phases in duplex stainless steel based on deep learning [J]. Journal of Materials Chemistry A, 2025, 13(1): 772-785.

[45] DE WINTER C, FRASINCAR F, DE PEUTER B, MSIIAKO V, IDO E, KLINKHAMER J. Automated feature engineering for automated machine learning[J]. Knowledge-Based Systems, 2025, 321: 113671.

[46] BENNASAR M, HICKS Y, SETCHI R. Feature selection using Joint Mutual Information Maximisation [J]. Expert Systems with Applications, 2015, 42(22): 8520-8532.

[47] FABER F, LINDMAA A, VON LILIENFELD O A, ARMIENTO R. Crystal structure representations for machine learning models of formation energies [J]. International Journal of Quantum Chemistry, 2015, 115(16): 1094-1101.

[48] KOHAVI R, JOHN G H. Wrappers for feature subset selection [J]. Artificial Intelligence, 1997, 97(1): 273-324.

[49] LEUNG Y, HUNG Y. A multiple-filter-multiple-wrapper approach to gene selection and microarray data classification[J]. IEEE/ACM Transactions on Computational Biology and Bioinformatics, 2010, 7(1): 108-117.

[50] DOMINGOS P. A few useful things to know about machine learning[J]. Communications of the ACM, 2012, 55(10): 78-87.

[51] GAO C C, MIN X, FANG M H, TAO T Y, ZHENG X H, LIU Y G, WU X W, HUANG Z H. Innovative materials science via machine learning[J]. Advanced Functional Materials, 2022, 32(1): 2108044.

[52] TIBSHIRANI R. Regression shrinkage and selection via the lasso [J]. Journal of the Royal Statistical Society: Series B (Methodological), 1996, 58(1): 267-288.

[53] UDDIN S, ONG S, LU H H. Machine learning in project analytics: A data-driven framework and case study [J]. Scientific Reports, 2022, 12(1): 15252.

[54] JULURU K, SHIH H H, KESHAVA MURTHY K N, ELNAJJAR P. Bag-of-words technique in natural language processing: A primer for radiologists[J]. Radiographics, 2021, 41(5): 1420-1426.

[55] SYRIOPOULOS P K, KALAMPALIKIS N G, KOTSIANTIS S B, VRAHATIS M N. kNN Classification: A review [J]. Annals of Mathematics and Artificial Intelligence, 2025, 93(1): 43-75.

[56] ELKATATNY S, ABD-ELAZIEM W, SEBAEY T A, DARWISH M A. Machine-learning synergy in high-entropy alloys: A review [J]. Journal of Materials Research and Technology, 2024, 33: 3976-3997.

[57] AGRAWAL A, CHOUDHARY A. Perspective: Materials informatics and big data: Realization of the "fourth paradigm" of science in materials science[J]. APL Materials, 2016, 4(5): 053208.

[58] HOCHREITER S, SCHMIDHUBER J. Long short-term memory [J]. Neural Computation, 1997, 9(8): 1735-1780.

[59] BAI X P, ZHANG X C. Artificial intelligence-powered materials science[J]. Nano-Micro Letters, 2025, 17: 135.

[60] JIANG J X, WAN X L, ZHU F XIAN D L, HU Z Y, MU S X. A deep learning framework integrating Transformer and LSTM architectures for pipeline corrosion rate forecasting[J]. Computers & Chemical Engineering, 2026, 204: 109365.

[61] KRIZHEVSKY A, SUTSKEVER I, HINTON G E. ImageNet classification with deep convolutional neural networks [J]. Communications of the ACM, 2017, 60(6): 84-90.

[62] MARTINEZ OSTORMUJOF T, PURUSHOTTAM RAJ PUROHIT R R P, BREUMIER S, GEY N, SALIB M, GERMAIN L. Deep Learning for automated phase segmentation in EBSD maps. A case study in Dual Phase steel microstructures [J]. Materials Characterization, 2022, 184: 111638.

[63] MOTYL M, MADEJ Ł. Supervised pearlitic-ferritic steel microstructure segmentation by U-Net convolutional neural network [J]. Archives of Civil and Mechanical Engineering, 2022, 22 (4): 206.

[64] CHEN X Y, CHENG L, HU C Y, ZHANG Y P, WU K M. Microstructure recognition of steels by machine learning based on visual attention mechanism[J]. Journal of Iron and Steel Research International, 2024, 31(4): 909-923.

[65] MA X L, TAOZ M, WANG Y H, YU H Y, WANG Y P. Long short-term memory neural network for traffic speed prediction using remote microwave sensor data[J]. Transportation Research Part C: Emerging Technologies, 2015, 54: 187-197.

[66] MENG L L,LI X L,LIU R, LI H Y, WANG X J, LIU W M, WEN J

L, ZHI M L. A soft measurement method for molten iron temperature based on the ARIMA-transformer-LSTM time series model[J]. JOM, 2026, 78(2): 1607-1622.

[67] WANGX F, ZHANG S J, JIANG D, YU W, ZHENGY H, LUO C Y, WANG H J, WANG Z D. Transformer-based multimodal learning for predicting mechanical properties in heat-treated stainless steel[J]. Materials & Design, 2025, 259: 114800.

[68] LUO X Y, ZHOUZ FLI B, ZHANG Y M, YI C L, SHI K, CHEN S S. Optimizing steel industry and air conditioning clusters using coordination-based time-series fusion transformer [J]. Processes, 2025, 13(10): 3265.

[69] JAIN A K. Data clustering: 50 years beyond K-means [J]. Pattern Recognition Letters, 2010, 31(8): 651-666.

[70] SCHUBERT E, SANDER J, ESTER M, KRIEGEL H P, XU X W. DBSCAN revisited, revisited: Why and how you should (still) use DBSCAN [J]. ACM Transactions on Database Systems, 2017, 42 (3): 1-21.

[71] JOLLIFFE I T, CADIMA J. Principal component analysis: A review and recent developments [J]. Philosophical Transactions of the Royal Society A, 2016, 374(2065): 20150202.

[72] DECOST B L, FRANCIS T, HOLM E A. Exploring the microstructure manifold: Image texture representations applied to ultrahigh carbon steel microstructures[J]. Acta Materialia, 2017, 133: 30-40.

[73] NGUYEN T N M, GUO Y C QIN S Y, FREW K S, XU R J, AGAR J C. Symmetry-aware recursive image similarity exploration for materials microscopy[J]. npj Computational Materials, 2021, 7 (1): 166.

[74] PAGAN D C, PHA T Q, WEAVER J S, BENSON A R, BEAUDOIN A J. Unsupervised learning of dislocation motion [J]. Acta Materialia, 2019, 181: 510-518.

[75] VINCENT P, LAROCHELL H, LAJOIE I, BENGIO Y, MANZAGOL P A. Stacked denoising autoencoders: Learning useful representations in a deep network with a local denoising criterion [J]. The Journal of Machine Learning Research, 2010, 11: 3371-3408.

[76] KIM Y, PARK H K, JUNG J, ASGHARI-RD P, LEE S, KIM J Y, JUNG H G, KIM S K. Exploration of optimal microstructure and mechanical properties in continuous microstructure space using a variational autoencoder[J]. Materials & Design, 2021, 202: 109544.

[77] WU X, XU K, HALL P. A survey of image synthesis and editing with generative adversarial networks [J]. Tsinghua Science and Technology, 2017, 22(6): 660-674.

[78] SUZUKI M, SHIZAWA K, MURAMATSU M. Deep learning-aided inverse analysis framework to accelerate the exploration of DP steel microstructures [J]. Materials Today Communications, 2024, 41: 110557.

[79] WENZLICK M, MAMUN O, DEVANATHAN R, ROSE K, HAWK J. Assessment of outliers in alloy datasets using unsupervised techniques[J]. JOM, 2022, 74(7): 2846-2859.

[80] LI Z X, YANG T X, KIMURA A, DOU P. Prediction of the tensile properties of ODS ferritic/martensitic steels under various temperature conditions using interpretable machine learning models [J]. Intermetallics, 2025, 186: 108962.

[81] DINIBUTUN S, ALSHAMMARI Y, PAROL J, BOLZONI L. Machine learning approaches for predicting ultimate tensile strength in 9% Cr steels [M]//AYADAT T. Civil and environmental engineering for resilient, smart and sustainable solutions. Pennsylvania: Materials Research Forum LLC, 2025: 501-509.

[82] MEREDG B, ANTONO E, CHURCH C, HUTCHINSON M, LING J, PARADISO S, BLAISZIK, FOSTER I, GIBBONS, HATTRICK-SIMPERS J, MEHTA A, WARD L. Can machine learning identify the next high-temperature superconductor? Examining extrapolation performance for materials discovery[J]. Molecular Systems Design & Engineering, 2018, 3(5): 819-825.

[83] LI K M, RUBUNGO A N, LEI X Y, PERSAUD D, CHOUDHARY K, DECOST B, DIENG A B, HATTRICK-SIMPERS J. Probing out-of-distribution generalization in machine learning for materials [J]. Communications Materials, 2025, 6(1): 9.

[84] LI K M, DCOST B, COUDHARY K, GREENWOOD M, HATRC-SIMPRS J. A critical examination of robustness and generalizability of machine learning prediction of materials properties [J]. npj Computational Materials, 2023, 9(1): 55.

[85] YANG L, SHAMI A. On hyperparameter optimization of machine learning algorithms: Theory and practice [J]. Neurocomputing, 2020, 415: 295-316.

[86] BERGSTRA J, BENGIO Y. Random search for hyper-parameter optimization[J]. The Journal of Machine Learning Research, 2012, 13: 281-305.

[87] JONES D, SCHONLAU M, WELCH W J. Efficient global optimization of expensive Black-Box Functions [J]. Journal of Global Optimization, 1998, 13: 455-492.

[88] POLI R, KENNEDY J, BLACKWELL T. Particle swarm optimization: An overview[J]. Swarm Intelligence, 2007, 1: 33-57.

[89] XU P C, JI X B, LI M J, LU W C. Small data machine learning in materials science[J]. npj Computational Materials, 2023, 9(1): 42.

[90] ZHON X T, GALLAGHER B, LIU S S, KAIKHURA B, HISZPANSKI A, HAN T Y J. Explainable machine learning in materials science [J]. npj Computational Materials, 2022, 8(1): 204.

[91] LECUN Y, BENGIO Y, HINTON G. Deep learning [J]. Nature, 2015, 521(7553): 436-444.

[92] CHOUDHARY K, DECOST B, CHEN C, JAIN A, TAVAZZA F, COHN R, PARK C W, CHOUDHARY A, AGRAWAL A, BILLINGE S J L, HOLM E, ONG S P, WOLVERTON C. Recent advances and applications of deep learning methods in materials science [J]. npj Computational Materials, 2022, 8(1): 59.

[93] TALAEI KHOEI T, OULD SLIMANE H, KAABOUCH N. Deep learning: Systematic review, models, challenges, and research directions [J]. Neural Computing and Applications, 2023, 35 (31): 23103-23124.

[94] BATRA R, SONG L, RAMPRASAD R. Emerging materials intelligence ecosystems propelled by machine learning [J]. Nature Reviews Materials, 2021, 6(8): 655-678.

[95] TIAN S H, JIANG X, WANG W R, JING Z H, ZHANG C ZHANG C, LOOKMAN T, SU Y J. Steel design based on a large language model[J]. Acta Materialia, 2025, 285: 120663.

[96] VAN DIS E A M, BOLEN J, ZUIDEMA W, VAN ROOIJ R, BOCKTING C L. ChatGPT: Five priorities for research[J]. Nature, 2023, 614: 224-226.

[97] KALIDINDI S R, DE GRAEF M. Materials data science: Current status and future outlook[J]. Annual Review of Materials Research, 2015, 45: 171-193.

[98] MÜLLER M, STIEFEL M, BACHMANN B I, BRITZ D, MÜCKLICH F. Overview: Machine learning for segmentation and classification of complex steel microstructures[J]. Metals, 2024, 14(5): 553.

[99] BULGAREVICH D S, TSUKAMOTO S, KASUYA T, DEMURA M, WATAABE M. Pattern recognition with machine learning on optical microscopy images of typical metallurgical microstructures [J]. Scientific Reports, 2018, 8(1): 2078.

[100] GOLA J, WEBEL J, BRITZ D, GUITAR A, STAUDT T, WINTER M, MÜCKLICH F. Objective microstructure classification by support vector machine (SVM) using a combination of morphological parameters and textural features for low carbon steels[J]. Computational Materials Science, 2019, 160: 186-196.

[101] GUPTA S, SARKAR J, KUNDU M, BANDYOPADHYAY N R GANGULY S. Automatic recognition of SEM microstructure and phases of steel using LBP and random decision forest operator[J]. Measurement, 2020, 151: 107224.

[102] CHOWDHURY A, KAUTZ E, YENER B, LEWIS D. Image driven machine learning methods for microstructure recognition [J]. Computational Materials Science, 2016, 123: 176-187.

[103] MÜLLER M, BRITZ D, ULRICH L, STAUDT T, MÜCKLICH F. Classification of bainitic structures using textural parameters and machine learning techniques[J]. Metals, 2020, 10(5): 630.

[104] TSUTSUI K, TERASAKI H, UTO K, MAEMURA T, HIRAMTSU S, HAYASHI K, MORIGUCHI K, MORITO S. A methodology of steel microstructure recognition using SEM images by machine learning based on textural analysis[J]. Materials Today Communications, 2020, 25: 101514.

[105] AJIOKA F, WANG Z L, OGAWA T, ADACHI Y. Development of high accuracy segmentation model for microstructure of steel by deep learning[J]. ISIJ International, 2020, 60(5): 954-959.

[106] DURMAZ A R, MÜLLER M, LEI B, THOMAS A, BRITZ D, HOLM E A, EBERL C, MÜCKLICH F, GUMBSCH P. A deep learning approach for complex microstructure inference[J]. Nature Communications, 2021, 12(1): 6272.

[107] MUÑOZ-RODENAS J, GARCÍA-SEVILLA F, COELLO-SOBRINO J, MARTÍNEZ-MARTÍNEZ A, MIGUEL-EGUÍA V. Effectiveness of machine-learning and deep-learning strategies for the classification of heat treatments applied to low-carbon steels based on microstructural analysis[J]. Applied Sciences, 2023, 13(6): 3479.

[108] IVO R F, DE A. RODRIGUES D, BEZERRA G M, FREITAS F N C, DE ABREU H F G, FILHO P P R. Non-grain oriented electrical steel photomicrograph classification using transfer learning [J]. Journal of Materials Research and Technology, 2020, 9(4): 8580-8591.

[109] MUÑOZ-RODENAS J, GARCÍA-SEVILLA F, MIGUEL-EGUÍA V, COELLO-SOBRINO J, MARTÍNEZ-MARTÍNEZ A. A deep learning approach to semantic segmentation of steel microstructures[J]. Applied Sciences, 2024, 14(6): 2297.

[110] SWAIN B R, CHO D, PARK J, ROH J S, KO J. Complex-phase steel microstructure segmentation using UNet: Analysis across different magnifications and steel types [J]. Materials, 2023, 16 (23): 7254.

[111] SHEN C G, WEI X L, WANG C C, XU W. A deep learning method for extensible microstructural quantification of DP steel enhanced by physical metallurgy-guided data augmentation [J]. Materials Characterization, 2021, 180: 111392.

[112] JUNG I D, SHIN D S, KIM D, LEE J, LEE M S, SON H J, REDDY N S, KIM M, MOON S K, KIM K T, YU J H, KIM S, PARK S J, SUNG H. Artificial intelligence for the prediction of tensile properties by using microstructural parameters in high strength steels [J]. Materialia, 2020, 11: 100699.

[113] REN D, WANG C C, WEI X L, LAI Q Q, XU W. Building a quantitative composition-microstructure-property relationship of dual-phase steels via multimodal data mining [J]. Acta Materialia, 2023, 252: 118954.

[114] REN D, WEI X L, WANG C C, XU W. Deep learning-based method for microstructure-property linkage of dual-phase steel [J]. Computational Materials Science, 2023, 227: 112285.

[115] LEE S I, SHIN S H, HWANG B. Application of artificial neural network to the prediction of tensile properties in high-strength low-carbon bainitic steels[J]. Metals, 2021, 11(8): 1314.

[116] LI Y, ZHAO J X, LI X C, XING Z, DUAN Q Q, LIANG X J, WANG X M. Predicting mechanical properties of low-alloy steels using features extracted from Electron Backscatter Diffraction characterization[J]. Journal of Materials Research and Technology, 2024, 33: 6494-6507.

[117] ZHANG Z Z, MATIVENGA P, ZHANG W H, HUANG S Q. Deep learning-driven prediction of mechanical properties of 316L stainless steel metallographic by laser powder bed fusion [J]. Micromachines, 2024, 15(9): 1167.

[118] KATEB M, SAFARIAN S. Machine learning-driven predictive modeling of mechanical properties in diverse steels [J]. Machine Learning with Applications, 2025, 20: 100634.

[119] XIONG J, ZHANG T Y, SHI S Q. Machine learning of mechanical properties of steels[J]. Science China Technological Sciences, 2020, 63: 1247-1255.

[120] JIANG X, JIA B R, ZHANG G F, ZHANG C, WANG X, ZHANG R J, YIN H Q, QU X H, SONG Y, SU L, MI Z L, HU L, MA H. A strategy combining machine learning and multiscale calculation to predict tensile strength for pearlitic steel wires with industrial data [J]. Scripta Materialia, 2020, 186: 272-277.

[121] LIN Z C, GUAN S Y, ZHANG W D, ZHANG H Y, LI Y G, ZHANG H P. Towards trustworthy LLMs: A review on debiasing and dehallucinating in large language models [J]. Artificial Intelligence Review, 2024, 57(9): 243.

[122] ALANSARI A, LUQMAN H. Large language models hallucination: A comprehensive survey[J]. Computer Science Review, 2026, 61: 100970.

[123] MESINOVIC M, WATKINSON P, ZHU T T. Explainability in the age of large language models for healthcare [J]. Communications Engineering, 2025, 4(1): 128.

[124] ANH-HOANG D, TRAN V, NGUYEN L M. Survey and analysis of hallucinations in large language models: Attribution to prompting strategies or model behavior [J]. Frontiers in Artificial Intelli-

gence, 2025, 8: 1622292.

[125] LAVRINOVICS E, BISWAS R, BJERVA J, HOSE K. Knowledge graphs, large language models, and hallucinations: An NLP perspective[J]. Journal of Web Semantics, 2025, 85: 100844.

[126] CHAKRABORTY S, CHOWDHURY R, SHUVO S R, CHATTERJEE R, ROY S. A scalable framework for evaluating multiple language models through cross-domain generation and hallucination detection[J]. Scientific Reports, 2025, 15(1): 29981.

[127] RAHMAN S S, ISLAM M A, ALAM M M, ZEBA M, RAHMAN A, CHOWA S S, RAIAAN M A K, AZAM S. Hallucination to truth: A review of fact-checking and factuality evaluation in large language models [J]. Artificial Intelligence Review, 2026, 59 (2): 70.

[128] CHAUDHARY N, ABU-ODEH A, KARAMAN I, ARRÓYAVE R. A data-driven machine learning approach to predicting stacking faulting energy in austenitic steels[J]. Journal of Materials Science, 2017, 52(18): 11048-11076.

[129] WANG X, XIONG W. Stacking fault energy prediction for austenitic steels: Thermodynamic modeling vs. machine learning [J]. Science and Technology of Advanced Materials, 2020, 21 (1): 626-634.

[130] LIU C, SU H. Prediction and rational design of stacking fault energy of austenitic alloys based on interpretable machine learning and chemical composition [J]. Steel Research International, 2024, 95 (8): 2400225.

[131] ARORA G, AIDHY D S. Machine learning enabled prediction of stacking fault energies in concentrated alloys[J]. Metals, 2020, 10 (8): 1072.

[132] LINDA A, AKHTAR M F, PATHAK S, BHOWMICK S. Accelerating the prediction of stacking fault energy by combining ab initio calculations and machine learning [J]. Physical Review B, 2024, 109(21): 214102.

[133] SAMANTA A, BALAPRAKASH P, AUBRY S, LIN B K. Machine-learning-aided density functional theory calculations of stacking fault energies in steel [J]. Scripta Materialia, 2024, 241: 115862.

[134] CURTZE S, KUOKKALA V T, OIKARI A, TALONEN J, HÄNNINEN H. Thermodynamic modeling of the stacking fault energy of austenitic steels[J]. Acta Materialia, 2011, 59(3): 1068-1076.

[135] ZAMBRANO O A. Stacking fault energy maps of Fe-Mn-Al-C-Si steels: Effect of temperature, grain size, and variations in compositions[J]. Journal of Engineering Materials and Technology, 2016, 138(4): 041010.

[136] SONG L Y, WANG C C, LI Y Z, WEI X L. Predicting stacking fault energy in austenitic stainless steels via physical metallurgy-based machine learning approaches[J]. Journal of Materials Informatics, 2025, 5(1): 2.

(责任编辑:宫文婧)