



基于主动机器学习指导的自主化相图构建方法

张恒睿, 来天行, 胡清云, 惠健, 鞠生宏, 汪洪

上海交通大学—材料科学与工程学院, 材料基因组联合研究中心

引言

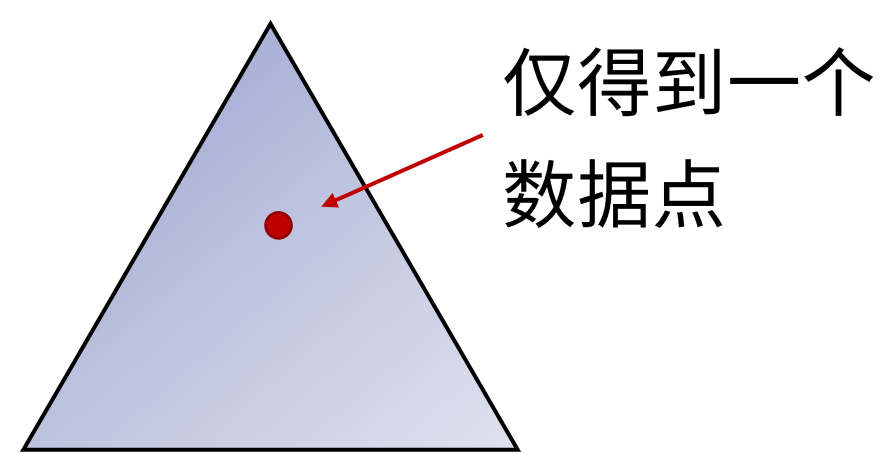
材料信息学的发展为材料科学研究带来了“数据驱动”的新范式, 极大地促进了对材料的理解、发现和合理设计。以相图为例, 通过制备具有成分梯度的组合材料芯片, 借助高通量X射线衍射 (XRD) 表征获得大量相结构数据并进行分析, 可快速完成相图的构建。利用闭环的实时决策方法, 可以实现“自主化”实验, 提高表征实验的选择性, 更快地完成对相边界的测定, 从而进一步提高相图构建的效率。

相图构建方法

传统方法

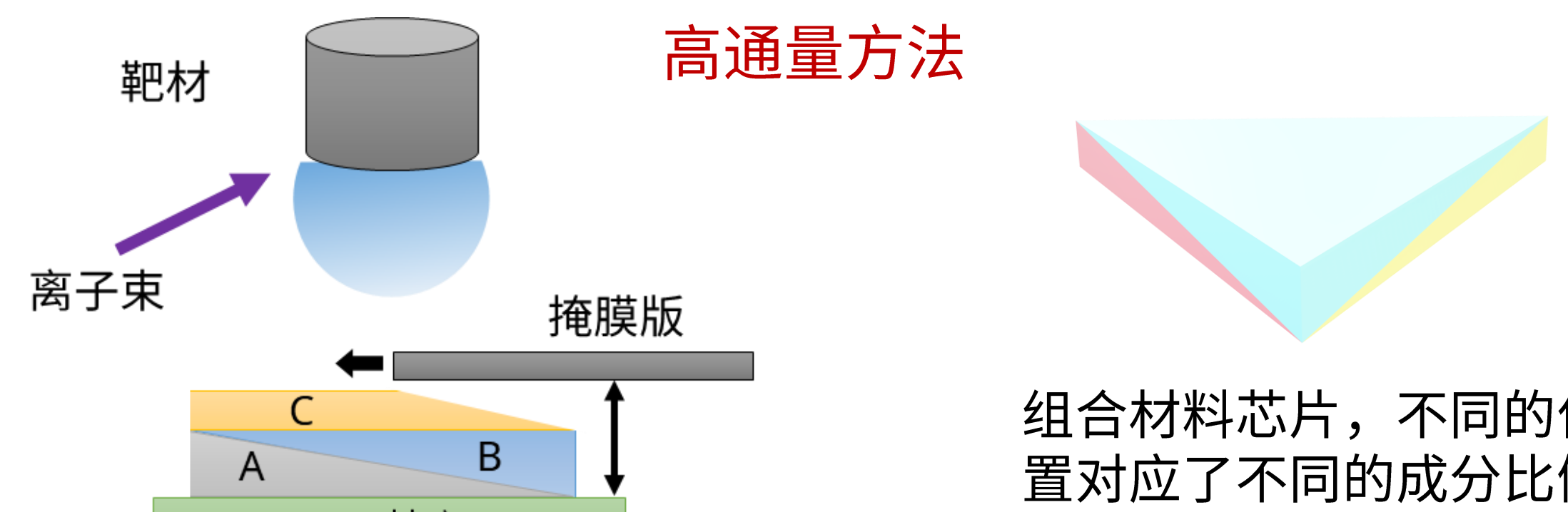


熔炼某一成分合金

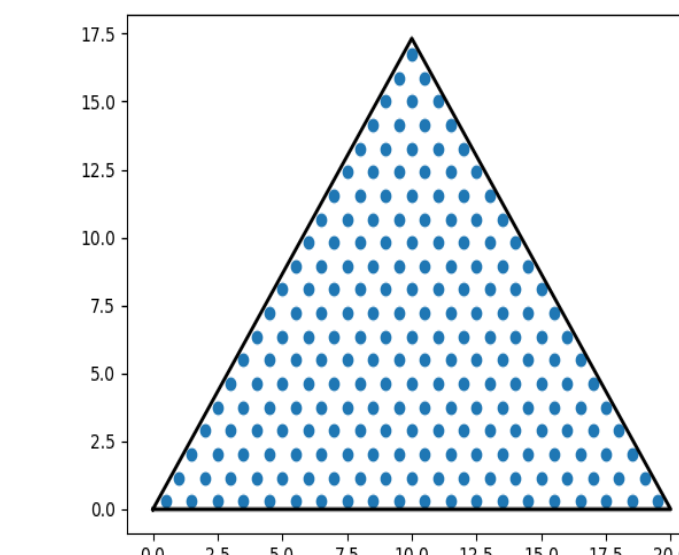


仅得到一个数据点

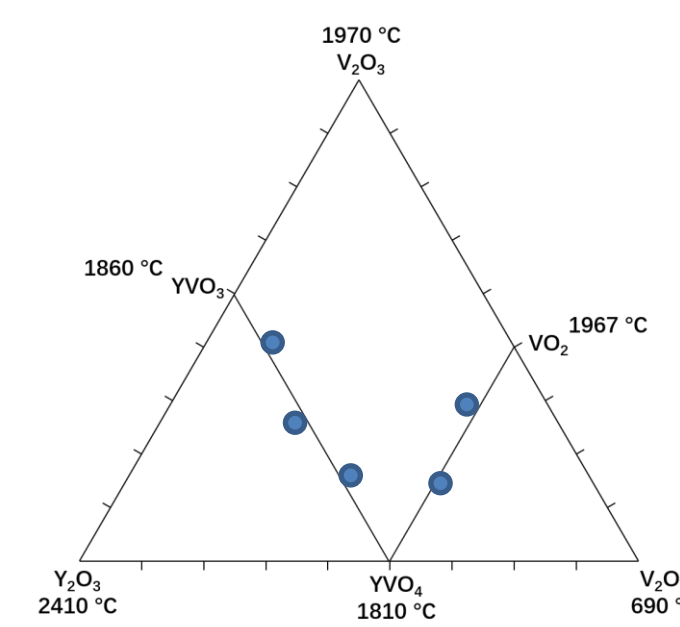
高通量方法



组合材料芯片, 不同的位置对应了不同的成分比例

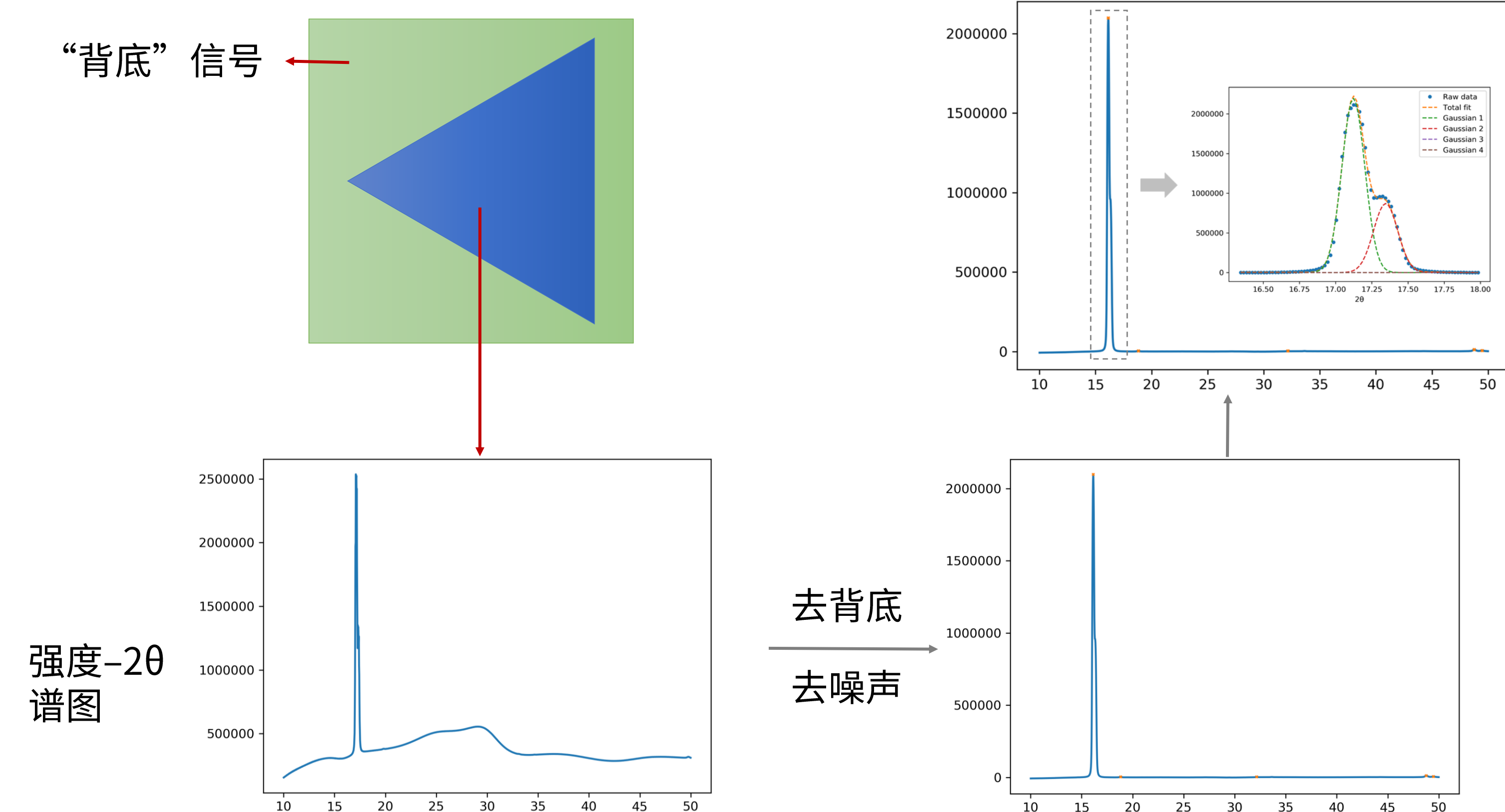


高通量XRD表征, 快速测定大量成分对应的相结构



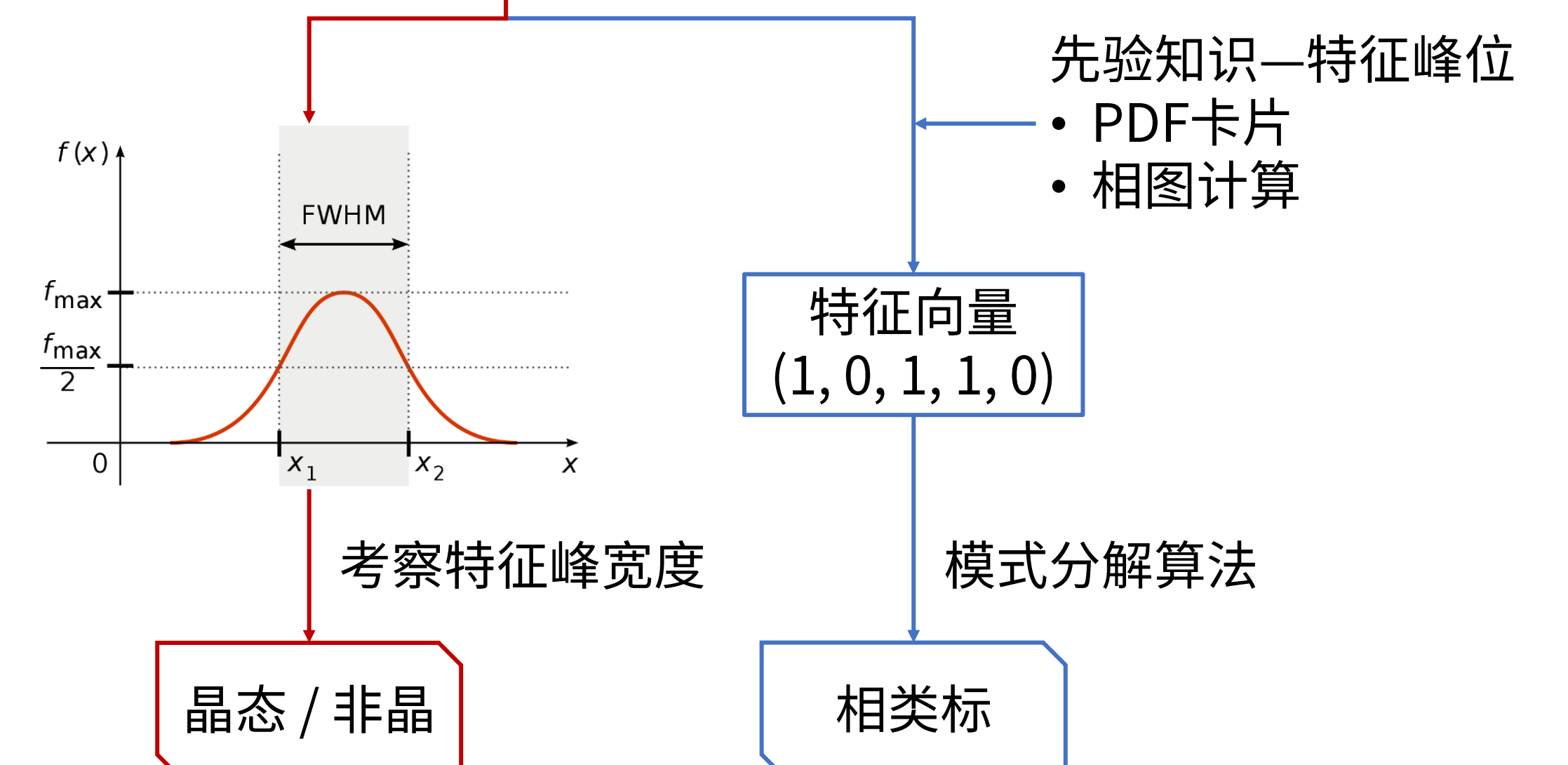
引入选择性, 效率可进一步提高

XRD数据分析

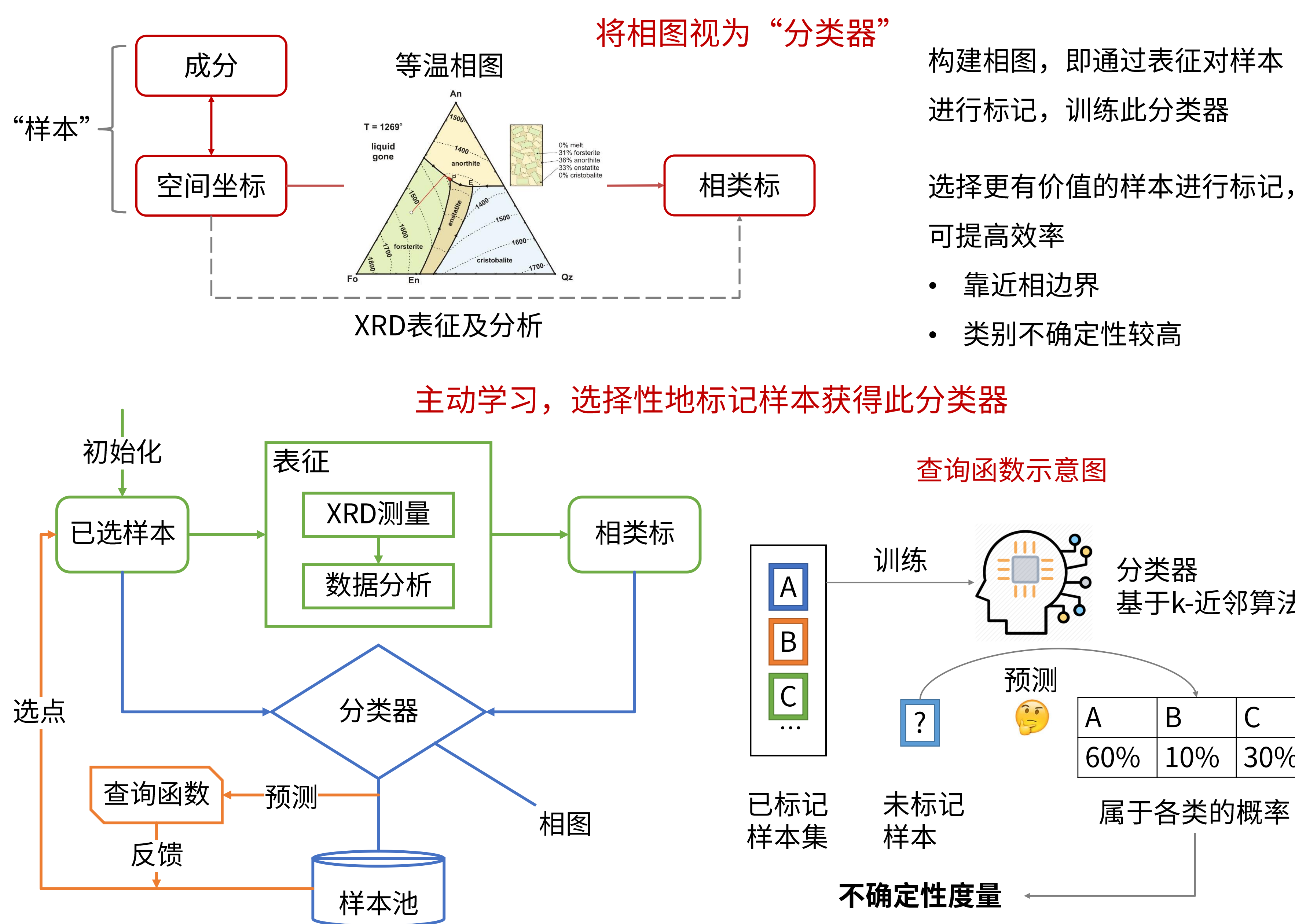


直接寻峰
高斯曲线拟合

衍射峰信息
• 峰高
• 峰宽
• 峰位 (2θ)



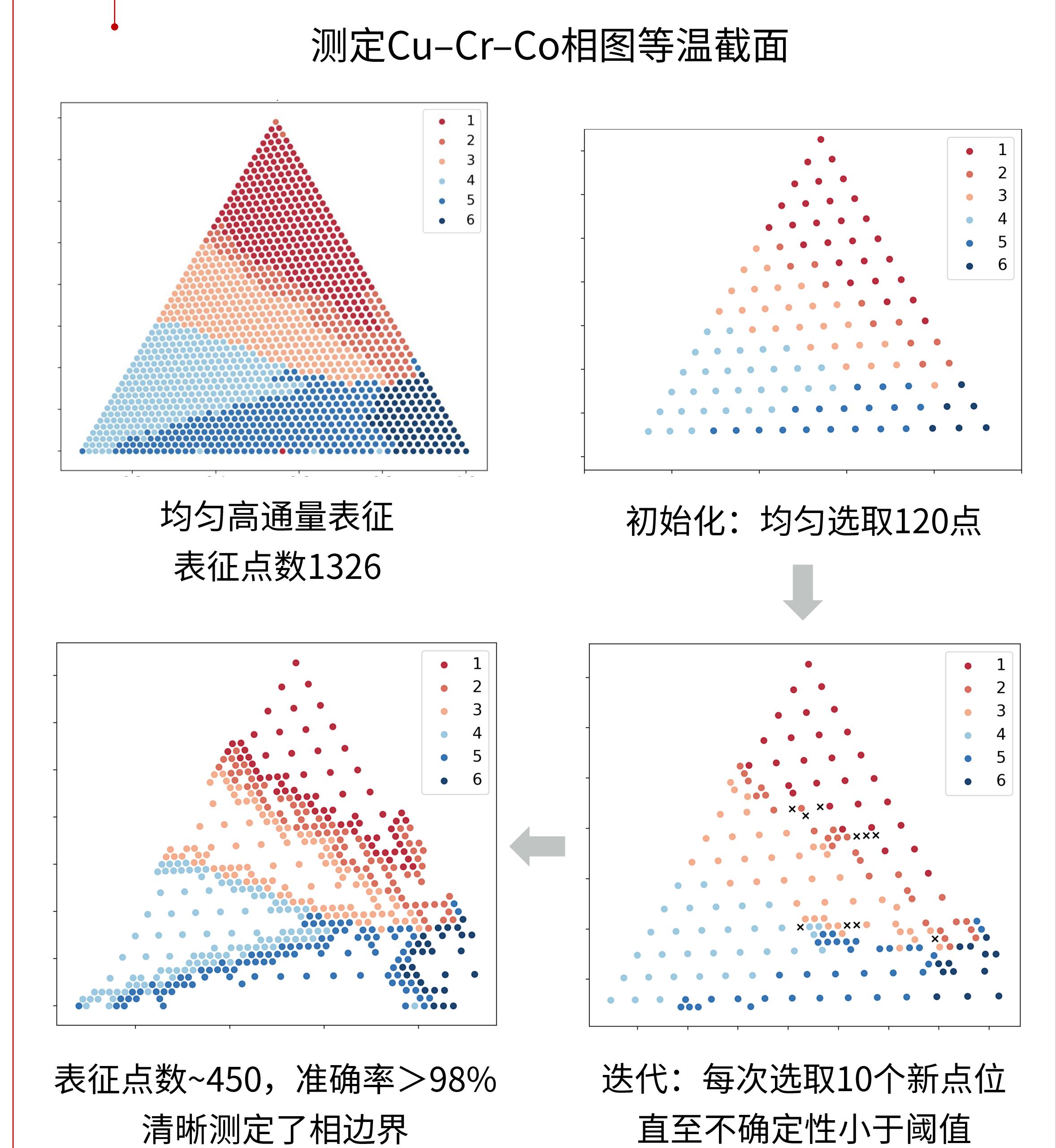
主动学习方法



总结与展望

1. 本工作中开发的主动学习框架, 与XRD数据实时分析方法相结合, 可实现自主化的相图构建, 将测定复杂三元相图所需的表征实验减少到1/3。
2. 在材料科学中, 一大类课题是研究材料的成分-性质关系, 其中相当一部分可转化为分类问题。主动学习方法在其中有着广泛的应用空间, 可促进实验或计算以“自主化”的方式进行, 从而提升数据获取效率。

用例展示



致谢

国家重点研发计划材料基因工程关键技术与支撑平台专项 (2017YFB0701900)
上海交通大学致远创新研究中心 (ZIRC-2018-05)

