【作品名称】机器学习辅助高性能金属材料氢脆机理研究——基于多尺度计算模拟

【关键字】金属材料、氢脆、机器学习、计算模拟

【作品简介】

本文旨在说明机器学习辅助氢脆机理研究的研究背景、灵感来源和研究内容

氢脆问题自20世纪40年代被发现以来，一直是严重威胁金属材料使用安全的一个重大问题。就氢脆问题而言，高强度金属材料往往对其敏感程度更高，因而限制了其在一般环境条件下的使用；近年来随着氢能源的兴起，如何制造一种能在高强氢分压下保持结构强度的材料，也成为一种紧迫的需求。

针对氢脆问题人们提出了多种机制，包括氢致位错发射理论、氢致局部塑形变形理论、氢致微裂缝聚合理论、氢压理论、弱键理论、氢降低表面能理论、氢致相变理论等其他理论。但是这些描述氢脆的理论都有其适用范围和对象，缺乏一种统一的描述。而从本质上来讲，氢脆现象是由于氢与金属产生交互作用而引起的。所以基于第一性原理的数值模拟的计算方法对于研究氢与金属基体交互作用的微观机理而言是一种有效可行的手段。

就本课题的定位而言，则主要是通过研究对材料本身性质不同而导致的对于氢脆响应的不同，注重研究结构与性质的关系。研究的主要方法是利用开源LAMMPS分子动力学软件结合 Python 二次开发实现对材料氢脆现象与材料中氢的扩散和偏聚过程的模拟，并采用机器学习算法对结果进行模型拟合，找出一定规律。

传统开发新材料的过程，都采用的试错法，实验步骤繁琐，研发周期长，浪费资源。随着计算机的发展，许多诸如第一性原理计算、相场模拟、有限元分析等手段随之出现，用以进行材料的结构以及性能方面的计算，但是往往计算量大，费用大。而超算技术介入材料科学带来的巨大信息使得结合材料数据库、数值模拟数据和机器学习方法驱动材料发现和材料设计并预测材料性能成为可能。

为了解决传统方法周期长、成本高问题，可以将所有的实验数据，计算模拟数据，整合起来形成具有一定规模的数据库；在数据库中，根据材料的某些属性可以建立机器学习模型，便可快速对材料的性能进行预测，甚至是设计新材料，解决相关问题。

注：作品简介篇幅**不得超过A4纸1页**，可附图不超过1张。