

利用机器学习构建 ODS 钢成分与拉伸性能关联模型

白冰, 韩煦, 郑全, 贾丽霞, 杨文

(反应堆工程技术研究部)

针对 ODS 合金, 收集了约 300 组实验数据, 每组数据包含 ODS 合金的成分、加工工艺、相结构、拉伸性能测试参数和拉伸性能数据等。针对已有的 ODS 合金拉伸性能影响因素的研究成果, 筛选出 9 种属性作为机器学习模型的输入, 包含 ODS 合金中 Cr 含量、 Y_2O_3 含量、W 含量、Ti 含量、Al 含量、成型工艺类型及温度、相结构和拉伸测试温度。

利用深度神经网络方法筛选出的 80% 数据作为训练集, 20% 数据作为测试集, 训练得到了精度大

于 80% 的机器学习模型, 以预测 ODS 合金的抗拉强度值, 并由此建立了 ODS 合金中关键成分与其抗拉强度的关联性, 如图 1 所示, 由此可知, ODS 合金中 Cr、 Y_2O_3 、Ti 和 Al 含量均存在对应着抗拉强度极值的最优值, 而 W 含量在约 1% 和 2.75%~3% 两个区间内有利于 ODS 合金强度的提高。将各关键成分含量在其较优值区间内取值, 以作为训练好的机器学习模型的输入, 所预测出的 ODS 合金室温抗拉强度均在 1400 MPa 以上, 该研究成果为后续的材料优化提出了新的建议和思路。

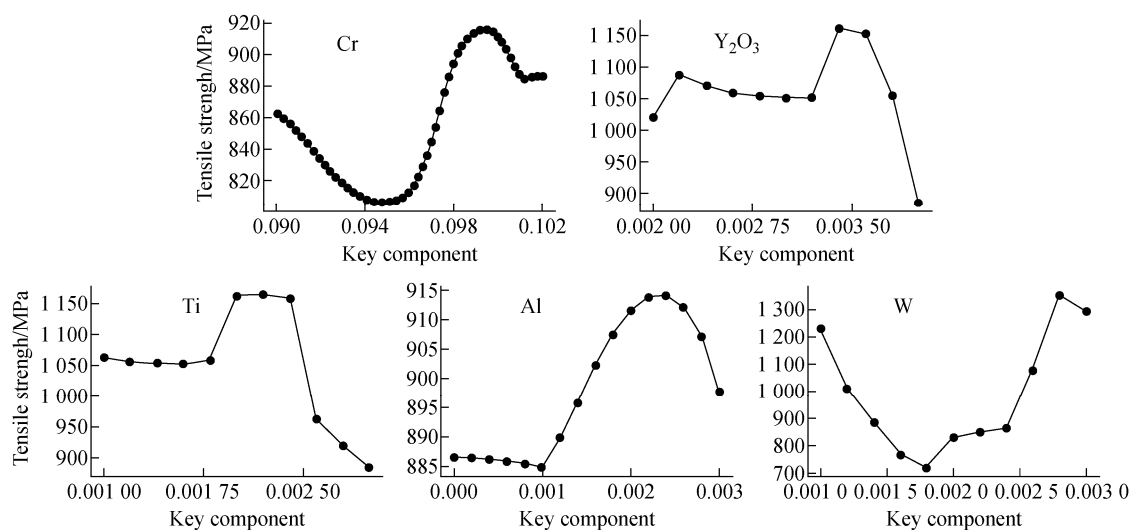


图 1 ODS 钢中关键成分与抗拉强度的关系预测

不同空位浓度下 Fe-1.34%Cu 合金热老化模拟*

王东杰, 贾丽霞, 贺新福

(反应堆工程技术研究部)

利用与北京科技大学、中国科学院计算所等单位最近合作开发的软件 MISA-KMC 模拟了 Fe-1.34%Cu 合金热老化。

模拟方法为原子级动力学蒙特卡罗 (AKMC), 原子放置在刚性晶格上, 系统能量采用对势计算。模拟温度为 573 K, 模拟盒子尺寸为 $250a_0 \times$