

# 基于深度卷积神经网络的 $\alpha$ -Fe 晶界能预测

陈 村<sup>1,2</sup>, 李六六<sup>1,2</sup>, 彭 蕾<sup>1,2\*</sup>, 时靖谊<sup>1,2\*</sup>

(1. 中国科学技术大学 核探测与核电子学国家重点实验室, 合肥 230026;

2. 中国科学技术大学 核科学技术学院, 合肥 230027)

**摘 要:** 本文提出了一种预测晶界能以研究  $\alpha$ -Fe 晶界性质的深度学习方法. 在分子动力学生成的  $\alpha$ -Fe 对称倾斜晶界的基础上, 通过中心对称参数和原子密度信息构造出晶界特征—积累中心对称参数, 提出了数据增强和按倾斜角分层抽样的方法, 建立了预测晶界能的卷积神经网络模型. 测试集结果表明, 预测晶界能的平均相对误差小于 1.75%, 平均每个晶界的预测用时在 0.002 s 以内. 该方法在一定范围内具有较高的准确性和鲁棒性, 提供了研究晶界的微观结构特征与宏观性能之间关联的途径.

**关键词:** 晶界; 卷积神经网络; 中心对称参数; 晶界能

中图分类号: 文献标识码: DOI: 10.19855/j.1000-0364.2021.210416082

## Prediction of grain boundary energy of $\alpha$ -Fe based on deep convolutional neural network

CHEN Cun<sup>1,2</sup>, LI Liu-Liu<sup>1,2</sup>, PENG Lei<sup>1,2\*</sup>, SHI Jing-Yi<sup>1,2\*</sup>

(1. State Key Laboratory of Particle Detection and Electronics, University of Science and Technology of China, Hefei 230026, China;

2. School of Nuclear Science and Technology, University of Science and Technology of China, Hefei 230027, China)

**Abstract:** A deep learning method for predicting grain boundary energy was proposed to study the grain boundary properties of  $\alpha$ -Fe in this paper. Based on the  $\alpha$ -Fe symmetric tilt grain boundary generated by molecular dynamics, we constructed the accumulated centro-symmetry parameters by using the centro-symmetry parameters and atomic density information. The methods of data augmentation and stratified sampling according to the tilt angle were proposed to establish the convolutional neural network model which can predict the grain boundary energy. The test results show that the average relative error of grain boundary prediction is less than 1.75%, and the average prediction time for each grain boundary is about 0.002s. In a certain range, this method can maintain high accuracy and robustness, and provides an approach to study the relationship between the grain boundary structural characteristics and properties.

**Key words:** Grain boundary; Convolutional neural network; Centro-symmetry parameters; Grain boundary energy

## 1 引 言

先进核反应堆结构材料铁素体/马氏体 (F/M) 钢在受到中子辐照后会产生大量的氢原子. 这些氢原子容易在结构钢中的晶界处聚集形成氢泡,

从而导致材料脆化. 不同的晶界对氢泡诱导脆化的敏感程度是不同的<sup>[1]</sup>. “晶界工程”<sup>[2]</sup>通过控制和设计晶界来改进材料性能, 首先需要获知结构钢中各晶界的性质. 晶界能作为晶界的主要特性之一, 可在一定程度上衡量晶界的性质<sup>[3]</sup>. 获取

收稿日期: 2021-04-16

基金项目: 国家自然科学基金(11805131)

作者简介: 陈村(1994—), 男, 浙江安吉人, 硕士研究生, 核能与核技术工程专业. E-mail: chencun@mail.ustc.edu.cn

通讯作者: 彭蕾. E-mail: penglei@ustc.edu.cn; 时靖谊. E-mail: shijy@ustc.edu.cn

晶界能的方法主要有理论推导、实验测量和模拟计算. 著名的 Read – Shockley 公式<sup>[4]</sup>基于理论推导得到了晶界能和取向差角之间的关系, 但仅适用于小角度晶界. Hasson 和 Goux<sup>[5]</sup>通过实验测定了 Al <100> 和 <110> 对称倾斜晶界的晶界能随取向差角的变化规律, 但该方法受到测量条件的限制, 难以大范围运用. 因此, 若能快速准确地获取晶界能, 将为“晶界工程”提供便利, 提高实验效率.

随着材料模拟技术的发展, 更多地是基于分子动力学来研究晶界结构和晶界能, 主要有考虑周期性边界条件的块状模型<sup>[6]</sup>和考虑非周期性边界的球形模型<sup>[7]</sup>. 分子动力学方法所要消耗的计算资源较大, 并随晶界体系的增大而增加, 难以满足“晶界工程”中计算大量晶界的需求. 因此, 有少数研究者<sup>[8-10]</sup>尝试从数据科学的角度出发, 在分子动力学模拟的基础上构造出合适的特征, 并通过机器学习模型<sup>[11]</sup>对 Al 的晶界性能进行预测, 但该方法的准确性受限于人为构造的特征, 特征的好坏将直接影响预测效果. 由于模型信息量大, 特征复杂, 人工提取合适特征的难度较大, 较难在大的倾斜角范围内得到应用.

近年来, 深度学习<sup>[12]</sup>以更深层的网络结构实现了自动提取特征的能力, 在图像、语音、自然语言处理等方面均取得了非凡的成绩, 也有研究者将其应用于生物蛋白质<sup>[13]</sup>、超高碳钢<sup>[14]</sup>和复合材料<sup>[15]</sup>中. 因此, 本文主要针对 F/M 钢模拟  $\alpha$ -Fe 中常见的对称倾斜晶界, 以中心对称参数和原子密度信息构建积累中心参数, 并通过具有高效提取空间信息能力的深度卷积神经网络算法 (CNN, Convolutional Neural Networks)<sup>[12]</sup>进行晶界能预测.

## 2 对称倾斜晶界库

针对  $\alpha$ -Fe 中常见的晶界, 本文挑选出其中的具有一定倾斜轴 (<100> 和 <110>) 和倾斜角  $\theta$  的对称倾斜晶界, 利用 LAMMPS 软件<sup>[16]</sup>构造出稳定晶界构型并计算相应的晶界能. 先按重合位置点阵 (CSL, Coincident Site Lattice) 模型<sup>[17]</sup>建立两个具有一定取向的  $\alpha$ -Fe 晶粒, 将其拼接后得到初步的双晶结构, 两者交界面即为晶界平面. 同时为避免周期性边界条件导致的双晶界互相影响, 遵循两晶界在晶界法向上间距大于 12 nm 的原则. 再应用晶界平面内平移 (In-plane Transla-

tions) 和原子删除判据 (Atom Deletion Criteria) 理论<sup>[18]</sup>枚举出大量可能的晶界构型. 然后在 0K 下对每一个晶界构型进行静力学弛豫并对晶界附近原子进行微小的调整, 筛选出能量最低的构型作为晶界结构. 其中铁原子间的相互作用通过 Ackland 等<sup>[19]</sup>发展的铁铁势函数 Ackland04 描述. 最后通过以下公式计算各晶界的晶界能大小:

$$\gamma_{gb} = \frac{E_{gb} - (E_1 + E_2)}{2A} \quad (1)$$

其中  $\gamma_{gb}$  代表晶界能,  $E_{gb}$  是含对称倾斜晶界双晶系统的势能,  $E_1$  和  $E_2$  分别是上下两个晶粒单独存在时的势能,  $A$  为晶界平面的大小.

结果如表 1 所示, 一共构建了 92 个具有最低能量构型的  $\alpha$ -Fe 对称倾斜晶界, 其中包括倾斜轴 <100> 的晶界结构 32 个和倾斜轴 <110> 的晶界结构 60 个.

## 3 深度学习模型与设计

预测晶界能的深度学习模型的整体流程如图 1 所示, 在前一节建立的对称倾斜晶界库上以原子坐标为基础构建晶界特征参数 (中心对称参数、积累中心对称参数). 再对完成特征构建的样本库进行分层抽样, 划分为训练集和测试集. 通过卷积神经网络模型在数据增强后的训练集上进行学习、验证, 并以测试集上预测的晶界能和模拟得到的晶界能间的相对差值来评估模型的真实预测效果.

### 3.1 特征参数构建

晶界平面附近的原子空间分布并不均匀, 直接以空间结构进行学习的有效性极低. 考虑到块状晶界模型的周期性边界条件, 本文以晶界原子的中心对称参数 (CS, Centro-symmetry Parameter)<sup>[20]</sup>分布替代晶界结构达到了简化模型的作用. CS 常用来衡量原子周围局部晶格的紊乱程度, 在晶界处有较大的正值. 在对称倾斜晶界模型中, CS 值仅与晶界平面法线方向 (下文以  $y$  轴代表该方向) 上的相对距离相关, 相同的晶界在  $y$  轴上具有相同的 CS 相对分布. 因此, 通过该参数可以将三维的空间信息简化到二维的相对分布, 从而降低计算复杂度, 相比于传统机器学习方法构造的特征也更为简便, 其计算公式<sup>[20]</sup>如下:

$$CS = \sum_{i=1}^{N/2} |R_i + R_{i+\frac{N}{2}}|^2 \quad (2)$$

其中  $N$  是每个原子的近邻原子个数, 体心立

表 1    $\alpha$ -Fe 对称倾斜晶界各晶界参数

Table 1   Grain boundary parameters of the symmetric tilt boundary in  $\alpha$ -Fe

Tilt angle/°	Sigma/ $\Sigma$	GBE/mJ/m <sup>2</sup>	Tilt angle/°	Sigma/ $\Sigma$	GBE/mJ/m <sup>2</sup>	Tilt angle/°	Sigma/ $\Sigma$	GBE/mJ/m <sup>2</sup>
Tilt axis <100> ( * : test set, others: train set)								
9.52	145	729	36.87	5	1008	64.01	89	1142
11.42	101	794	41.11	73	1154	67.38	13	1108
12.68	41	825	43.6	29	1181	71.08	37	1058
14.25	65	873	46.4	29	1183	73.74	25	1002
16.26	25	908	47.92	97	1197	75.75	65	945
* 18.92	37	972	48.88	73	1192	77.32	41	900
22.62	13	1005	53.13	5	1112	* 79.61	61	820
25.06	85	1071	57.22	157	1175	81.2	85	754
28.07	17	1092	* 58.11	53	1168	82.37	113	699
31.89	53	1114	59.49	65	1166	83.27	145	653
* 33.4	109	1108	61.93	17	1118			
Tilt axis <110> ( * : test set, others: train set)								
10.1	129	901	58.99	33	1253	114.53	171	729
11.54	99	960	* 61.02	97	1280	115.7	113	789
* 13.44	73	1027	62.44	67	1282	117.56	67	869
14.65	123	1062	64.3	113	1309	* 118.98	97	919
20.05	33	1205	70.53	3	1308	121.01	33	978
26.53	19	1312	75.29	193	1325	124.12	41	1043
28.84	129	1343	77.88	81	1305	126.41	123	1095
* 31.59	27	1245	80.63	43	1255	129.54	11	1113
33.72	107	1351	* 82.95	57	1262	132.31	153	1180
34.89	89	1343	86.63	17	1207	136	57	1215
36.15	187	1344	89.42	99	1184	141.06	9	1167
38.94	9	1286	90.58	99	1167	145.11	89	1236
* 42.18	139	1282	93.37	17	1110	* 146.28	107	1232
42.89	187	1272	95.45	179	1062	148.41	27	1217
44	57	1244	97.05	57	1022	* 151.16	129	1207
47.69	153	1160	* 99.36	43	943	153.47	19	1154
50.48	11	1019	100.96	121	881	159.95	33	1106
* 53.59	123	1158	102.12	81	831	166.56	73	962
54.43	153	1178	104.71	193	700	168.46	99	896
55.88	41	1207	109.47	3	260	169.9	129	844

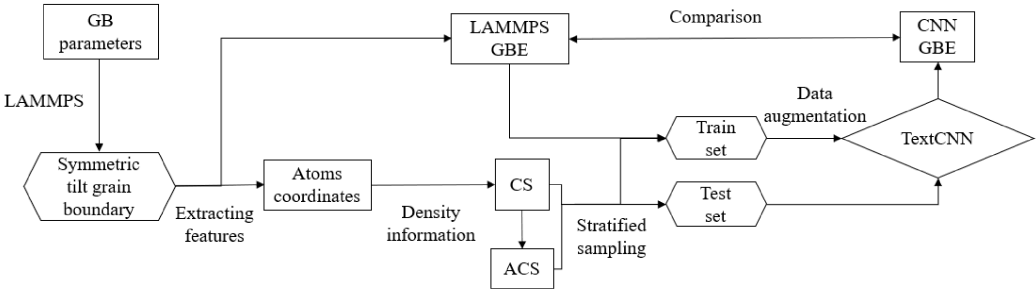


图 1   预测晶界能流程图

Fig. 1   Flow chart of grain boundary energy prediction

方晶体固定为 8,  $R_i, R_{i+\frac{N}{2}}$  是中心原子到一对处于对称位置的近邻原子的矢量对. 为了适合在 CNN 中作为输入, 利用局部二次回归模型对离散的中心对称参数(如图 2 离散点所示)进行拟合, 得到了连续的中心对称参数分布(如图 2 红色线所示). 通过分析该分布的二阶导数, 可以找到晶界和晶粒的分界面(如图 2 虚线所示, 中间即为晶界区域), 统计发现晶界区域主要集中在 y 方向上的

(-20 Å, 20 Å)区间内. 同时, 考虑到不同倾斜角的晶界在 y 方向上的原子密度是不同的, 本文利用伊番科尼可夫核函数(Epanechnikov Kernel)融合进原子密度信息构造了积累中心对称参数(ACS, 如图 2 绿色线所示). 最终对(-20 Å, 20 Å)区间内的 CS 和 ACS 分布分别等间隔地取 401 个值作为模型的输入特征.

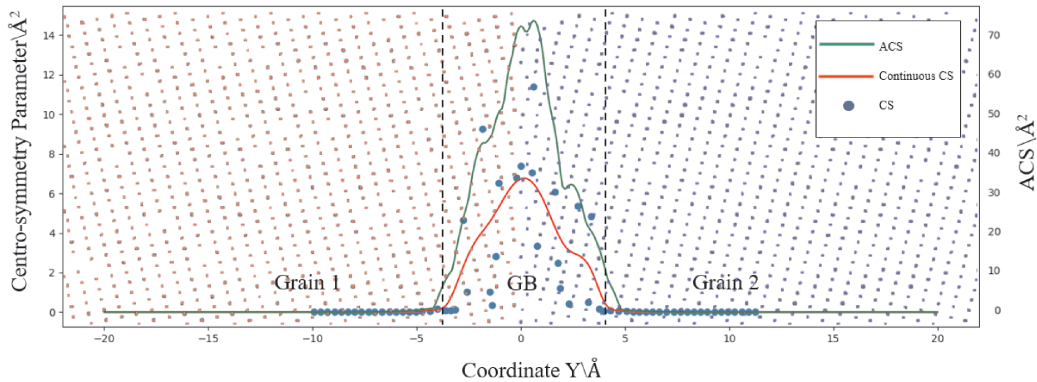


图 2  $\langle 110 \rangle$  倾斜轴的  $\Sigma 9$  对称倾斜晶界上中心对称参数、连续的中心对称参数以及积累中心对称参数随 y 轴坐标的分布图

Fig. 2 For a  $\Sigma 9$  symmetric tilt grain boundary with a tilt axis of  $\langle 110 \rangle$ , the distribution of centro - symmetry parameter, continuous centro - symmetry parameter and accumulate centro - symmetry parameter along Y coordinate

3.2 卷积神经网络模型

本文以适合一维卷积的 TextCNN 模型<sup>[21]</sup>为基础, 通过 PYTORCH 1.5.1 搭建了卷积神经网络模型, 整个模型的参数量在  $1.7 \times 10^5$  左右. 如图 3 所示, 模型主要由卷积层、池化层(Pooling)和两层全连接层(FCN)组成. 卷积层通过卷积核的滑动进行卷积计算, 本文使用了多个不同尺寸的卷积核, 单个尺寸卷积核设置为 k (50、100、150、200) 个, 卷积计算后通过修正线性单元(ReLU)<sup>[11]</sup>引入非线性. 池化层作为一种下采样操作主要用于降维, 对每一组特征采用最大值池化中的 Chunk - Max - Pooling<sup>[21]</sup>筛选出局部最大的 4 个值. 最后将池化层输出的特征按序拼接后展平输入隐藏层单元为 (64, 16) 的全连接层, 并以 0.5 的概率暂时丢弃一定数量的神经元, 防止网络出现过拟合现象. 使该模型在训练集上循环训练 1000 个周期, 并通过平滑的 L1 损失<sup>[11]</sup>更新模型的参数. 参数的更新算法采用 Adam 算法<sup>[22]</sup>, 参数更新的学习率对于 ACS 特征设置为  $3e^{-4}$ , 对于 CS 特征前 100 个周期设置为  $1e^{-4}$ , 之后为  $1e^{-5}$ .

4 预测结果与分析

依据表 1 的对称倾斜晶界库统计了晶界能随倾斜角的分布, 如图 4 所示. 这与 Yasushi S 等<sup>[23]</sup>构建的体心立方晶体对称倾斜晶界的晶界能随倾斜角的分布相接近. 从图中可见, 相邻倾斜角的晶界能较为接近, 因此, 本文通过按倾斜角分层抽样的方法划分了训练集和测试集. 首先, 统计晶界在各倾斜角区间的样本个数, 尽可能地保留稀疏区间的样本作为训练集, 最终以 28 个  $\langle 100 \rangle$  倾斜轴晶界和 50 个  $\langle 110 \rangle$  倾斜轴晶界分别作为原始训练集. 考虑到较小的训练集样本个数会导致模型的鲁棒性不足, 在保持晶界相对结构不变的前提下, 通过在 y 轴上对晶界进行平移(Translation)和翻转(Rotation)实现了训练集的数据增强(Data Augmentation)<sup>[24]</sup>. 最终以 1848 个  $\langle 100 \rangle$  倾斜轴样本和 3300 个  $\langle 110 \rangle$  倾斜轴样本作为训练集输入卷积神经网络进行学习, 并在所有测试集上, 以分子动力学计算的目标晶界能和 CNN 模型预测的晶界能间的平均相对误差  $\bar{\varepsilon}$  作为评价标准, 具体公式为:

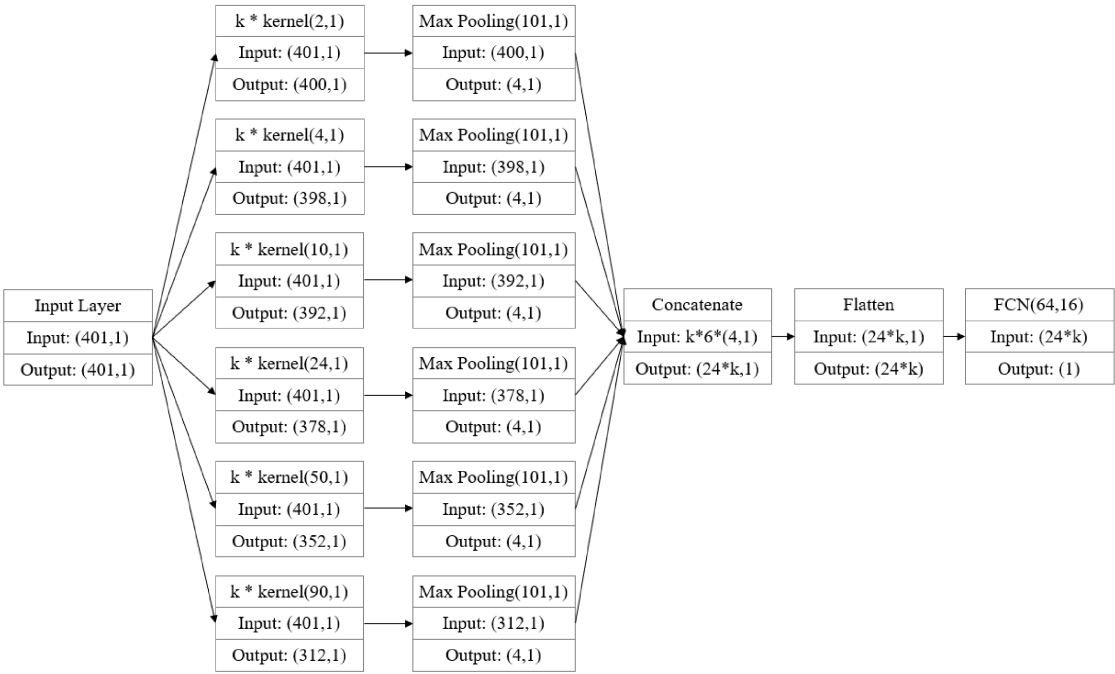


图 3 卷积神经网络模型框架图

Fig. 3 Illustration of convolutional neural networks framework

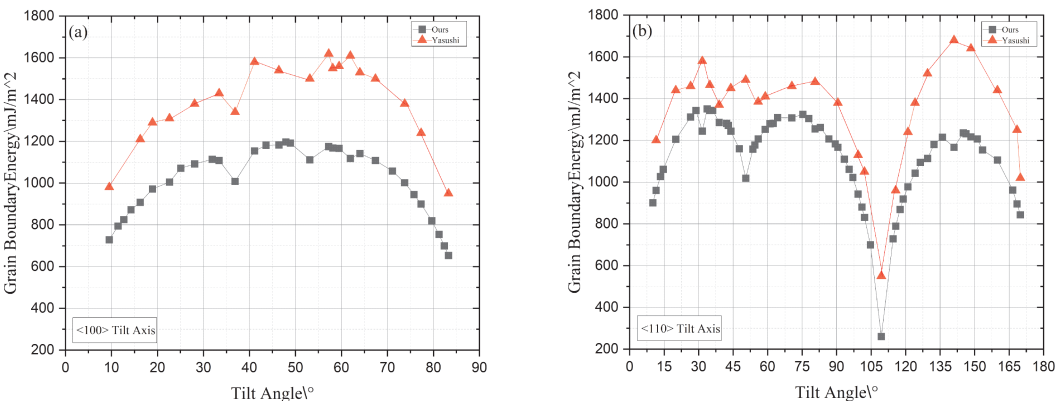


图 4  $\alpha$ -Fe 中倾斜轴为 (a)  $\langle 100 \rangle$  和 (b)  $\langle 110 \rangle$  的对称倾斜晶界倾斜角与晶界能关系图

Fig. 4 Grain boundary energies of the symmetric tilt boundaries in  $\alpha$ -Fe as a function of tilt angle for the tilt axes of (a)  $\langle 100 \rangle$  and (b)  $\langle 110 \rangle$

$$\bar{\varepsilon} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \frac{100 | \gamma_i - o_i |}{\gamma_i} \quad (3)$$

式中  $\gamma_i$  为分子动力学计算的目标晶界能,  $o_i$  为预测晶界能,  $n$  为测试样本数.

4.1 晶界能预测结果

不同卷积核尺寸的模型预测晶界能的平均相对误差随训练周期的变化如图 5(a) 所示, 这里同尺寸卷积核的个数设置为 100 个. 可以看到, 平均相对误差随循环周期增加逐渐下降, 在 1000 个周期时均能趋于平稳, 并未出现再次上升的情况, 这说明模型未出现过拟合现象. 其中 ACS 特征在参数更新的学习率高于 CS 特征的情况下误差下

降趋势仍更缓慢, 这在一定程度上反映了 ACS 特征相比于 CS 特征更加地复杂, 难以学习. 在所有模型中, ACS 特征在卷积核尺寸为 (2, 4, 10, 24, 50, 90) 的网络中取得了最低的平均相对误差 1.74%, 而同模型 CS 特征的平均相对误差仅为 4.17%, 增大了 2.43%. 在其余同卷积核尺寸模型中, ACS 特征模型的平均相对误差均低于 CS 特征模型. 进一步分析同特征在不同尺寸卷积核模型上的表现: ACS 特征在 (2, 4)、(2, 4, 10, 24)、(2, 4, 10, 24, 50, 90) 卷积核模型上的平均相对误差依次为 5.08%、3.90% 和 1.74%, CS 特征为 6.31%、5.94% 和 4.17%. 通过比较差

值发现，无论是 ACS 特征还是 CS 特征，更大尺寸的卷积核使模型平均相对误差下降更明显。而由于输入参数规模的限制，进一步设置更大尺寸的卷积核较为困难，通过增加同尺寸卷积核的个数亦能得到更大规模的卷积网络模型，因此在图 5(b)中以卷积核尺寸为(2, 4, 10, 24, 50, 90)

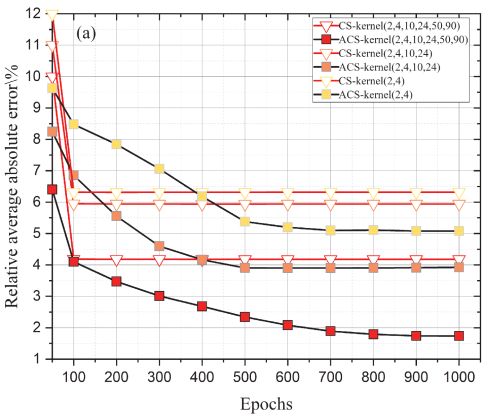


图 5 (a)不同模型预测晶界能的平均相对误差随循环周期变化 (b) 平均相对误差随卷积核个数的变化

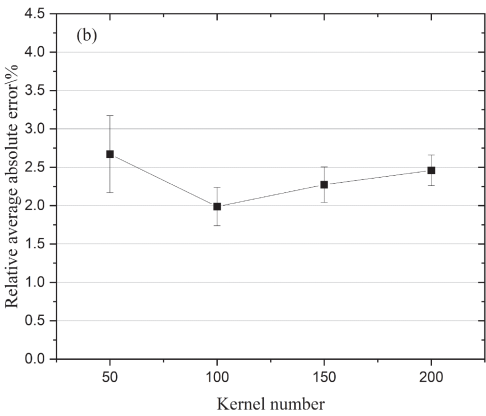
Fig. 5 (a)Relative average absolute errors (%) of predicted grain boundary energies of the different CNNs. (b) Relative average absolute errors (%) of the different convolutional kernel numbers

针对具有最低平均相对误差的卷积核尺寸为(2, 4, 10, 24, 50, 90)、同尺寸卷积核个数为 100 的模型，比较了分子动力学计算的晶界能和模型预测的晶界能间的差距。如图 6(a - b)所示，CS 特征模型在测试集上的平均相对误差(4.17%)高于 ACS 特征模型(1.74%)，样本分布更为离散，出现较大相对误差的可能性也更大。经图 6(c - d)统计，测试集上，ACS 特征模型的最大相对误差小于 6%，而 CS 特征模型则达到了 10%。由于测试集样本较少，在图中一并统计了原始训练集上的相对误差样本分布，可见 ACS 特征模型上的分布也更为集中。综合以上结果，ACS 特征模型相比于 CS 特征模型在预测晶界能的任务中有更大的优势。相比于文献 8 以机器学习方法在 Al 的非对称倾斜晶界上预测晶界能取得的结果(晶界能在 200 至 600mJ/m<sup>2</sup>范围内的平均绝对值误差为 11.35 mJ/m<sup>2</sup>)，本文在更广倾斜角范围的对称倾斜晶界上取得了相当的结果。

通过输出 TextCNN 最后一层网络的权值可以得到经该模型加工后的 16 维晶界特征( $v_i$ )和晶界能( $GBE$ )间的定量关系：

$$GBE = 0.23 v_1 - 0.28 v_2 + 0.19 v_3 + 0.28 v_4 - 0.26 v_5 + 0.27 v_6 + 0.14 v_7 - 0.14 v_8 - 0.15 v_9 - 0.12 v_{10} - 0.21 v_{11} - 0.30 v_{12} -$$

的模型作为基础模型，通过改变单个尺寸卷积核的个数，比较了更大规模网络的平均相对误差。结果表明，在单尺寸卷积核个数为 100 的模型上平均相对误差是最低的，稳定在 2% 左右，最低可达到 1.74%。



$$0.16 v_{13} + 0.19 v_{14} - 0.13 v_{15} + 0.21 v_{16} \quad (4)$$

4.2 分层抽样和数据增强的影响

为了进一步确认按倾斜角分层抽样对模型预测能力的影响是正向的，在部分的数据集上分别以 CS 和 ACS 作为晶界特征在同样的模型上比较了三种抽样方式(按倾斜轴分层抽样、随机抽样、不均匀抽样)对模型预测能力的影响。其中，不均匀抽样是只选择了倾斜角较大的样本。在同样的测试集上计算了晶界能的平均相对误差，结果如图 7 所示，不论是 ACS 特征还是 CS 特征，分层抽样得到的平均相对误差均是最小的，随机抽样次之，不均匀抽样最大。这表明了不同倾斜角的对称倾斜晶界的晶界结构是有一定的差异的，仅使用一定倾斜角范围内的晶界将导致样本在特征空间分布不均匀，易发生过拟合的情况，在更大倾斜角范围内的晶界上预测结果较差。因而通过按倾斜角分层抽样的途径，能让训练样本空间分布得更加均匀，使模型在测试集晶界上能有更准确的预测结果。

如图 8 所示，以同一模型为基础，对同一训练集进行数据增强，通过改变增强样本的个数在相同测试集上比较了平均相对误差的变化。结果表明，相较于未进行数据增强的模型，合理引入增强样本能够降低模型预测晶界能的平均相对误



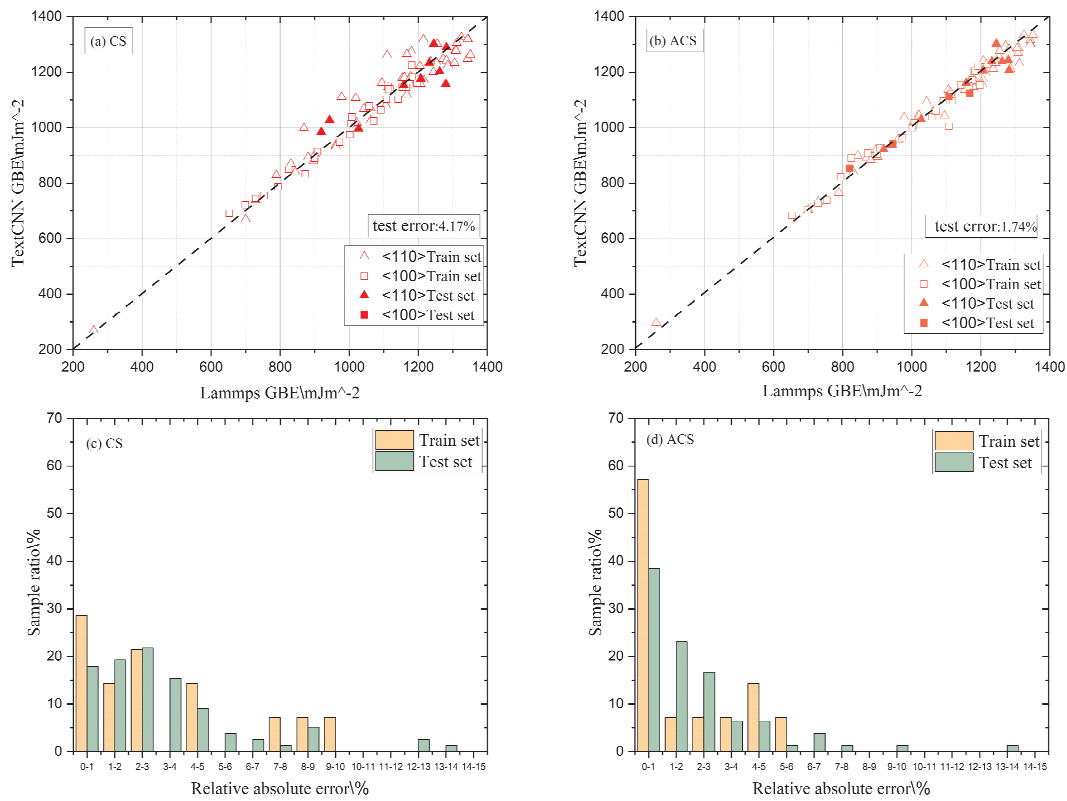


图 6 (a - b) 所有样本集上原始晶界能和预测晶界能对比图, (c - d) 预测结果统计分布图。  
Fig. 6 (a - b) The original GB energies are compared with the predicted GB energies in the whole set; (c - d) Statistical result of network prediction

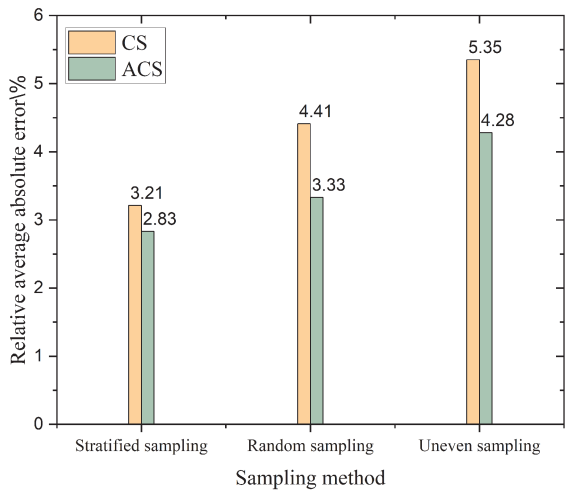


图 7 不同训练集采样方法在 CNN 模型上预测晶界能平均相对误差的变化  
Fig. 7 Relative average absolute errors (%) of predicted grain boundary energies of the CNN varies with the different sampling methods

差, 而随着增强样本个数的增多, 平均相对误差在增强样本个数为 65 左右时达到了最低点, 随后出现了一定的上升. 由此可见, 数据增强在一定范围内能够合理地增加训练集的个数, 提高模型的鲁棒性, 但随着平移尺度的加大和增强样本个

数的增多, 对模型引入了一些负面的噪声, 改变了训练数据的主要特征分布, 导致模型的预测精度产生了一定的下降, 类似的结论在文献<sup>[25]</sup>中也有体现. 因此, 选择合适的增强尺度和增强样本个数对提升模型的预测性能是十分重要的.

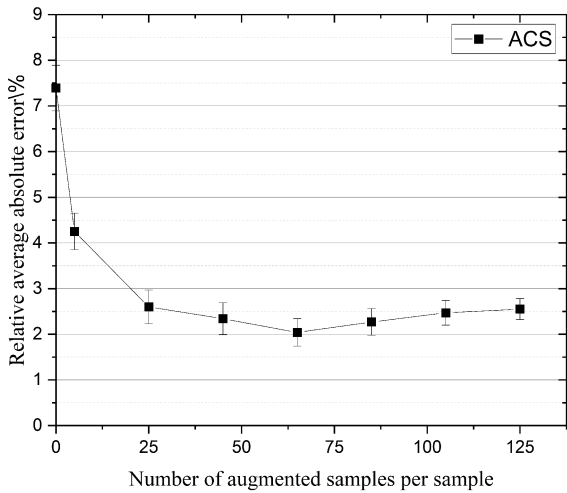


图 8 不同数据增强样本个数下预测晶界能平均相对误差的变化  
Fig. 8 Relative average absolute errors (%) of predicted grain boundary energies varies with the augmented sample numbers

## 5 结 论

本文基于卷积神经网络 TextCNN 结构, 在  $\alpha$ -Fe 的  $\langle 100 \rangle$  和  $\langle 110 \rangle$  倾斜轴的对称倾斜晶界上建立了晶界能预测模型. 以融合原子密度信息的积累中心对称参数作为晶界特征, 通过按倾斜角分层抽样和“翻转平移”的数据增强方法进一步提升了模型的效果. 测试集结果表明, 该方法预测晶界能的平均相对误差小于 1.75%. 通过该方法, 本文在深度学习的模型基础上建立了晶界结构和晶界能之间的连接, 这种连接方法同样可用于预测其他晶界性能, 为进一步研究 F/M 钢晶界工程提供了支撑.

### 参考文献:

- [1] Shi J Y, Gao F, Peng L, Ye M Y. Effects of He bubble and Cr precipitate on tensile deformation of grain boundaries in  $\alpha$ -Fe [J]. IEEE Trans., 2017, 45: 289.
- [2] Mishin Y, Asta M, Li J, et al. Atomistic modeling of interfaces and their impact on microstructure and properties [J]. Acta Mater., 2010, 58: 17.
- [3] Yang W D. Materials for nuclear application [M]. Beijing: Atomic Energy Press, 2000 (in Chinese) [杨文斗. 反应堆材料学[M]. 北京:原子能出版社, 2000]
- [4] Read W T, Shockley W, et al. Dislocation models of crystal grain boundaries[J]. Phys. Rev., 1950, 78: 275.
- [5] Hasson G C, Goux C, et al. Interfacial energies of tilt boundaries in aluminium [J]. Scripta Metall., 1971, 5: 889.
- [6] Olmsted D L, Foiles S M, Holm E A. Survey of computed grain boundary properties in face-centered cubic metals [J]. Acta Mater., 2009, 57: 3694.
- [7] Lee B J, Choi S H, et al. Computation of grain boundary energies [J]. Model. Simul. Mat. Sci. Eng., 2004, 12: 621.
- [8] Joshua A G, Andrew J M, et al. Extracting knowledge from molecular mechanics simulations of grain boundaries using machine learning [J]. Acta Mater, 2017, 133: 100.
- [9] Kalidindi S R, Gomberg J A, et al. Application of data science tools to quantify and distinguish between structures and models in molecular dynamics datasets [J]. Nanotechnology, 2015, 26: 34.
- [10] Dong X, McDowell D L, et al. Dependence of mechanical properties on crystal orientation of semi-crystalline polyethylene structures [J]. Polymer., 2014, 55: 16.
- [11] Zhou Z H. Machine learning [M]. Beijing: Tsinghua University Press, 2016 (in Chinese) [周志华. 机器学习[M]. 北京:清华大学出版社, 2016]
- [12] Ian G, Yoshua B, Aaron C. Deep Learning [M]. Cambridge: The MIT Press, 2016.
- [13] Andreas M, Luca P, et al. Deep learning of molecular kinetics [J]. Nat. Commun., 2018, 9: 5.
- [14] Brain L D, Bo L. High throughput quantitative metallography for complex microstructures using deep learning: a case study in ultrahigh carbon steel [J]. Microsc. Microanal., 2019, 25: 21.
- [15] Yan H, Deng Z M. Prediction of properties of short fiber reinforced urethane polymer composites based on deep learning [J]. Acta Materiae Compositae Sinica, 2019, 36: 1413 (in Chinese) [闫海, 邓忠民. 基于深度学习的短纤维增强聚氨酯复合材料性能预测[J]. 复合材料学报, 2019, 36: 1413]
- [16] Plimpton S, Crozier P, Thompson A. LAMMPS large scale atomic/molecular massively parallel simulator [J]. J. Appl. Phys., 2015, 20: 4740.
- [17] Bollmann W. Crystal Defects and Crystalline Interfaces [M]. Heidelberg: Springer Verlag, 1970.
- [18] Pumphrey P H, Malis T F, et al. Rigid body translations at grain boundaries [J]. Philos. Mag., 1976, 34: 227.
- [19] Ackland G J, Mendelev M I, Srolovitz D J. Development of an interatomic potential for phosphorus impurities in alpha-iron [J]. J. Phys.: Condens. Matter, 2004, 16: S2629.
- [20] Kelchner C L, Plimpton S J, Hamilton J C. Dislocation nucleation and defect structure during surface indentation [J]. Phys. Rev. B, 1998, 58: 11085.
- [21] Yoon K. Convolutional neural networks for sentence classification [C]. EMNLP, 2014.
- [22] Kingma D, et al. Adam: a method for stochastic optimization [C]. ICLR, 2015.
- [23] Yasushi S, Shinya T, Toshio S. A molecular dynamics study of the energy and structure of the symmetric tilt boundary of iron [J]. ISIJ International, 2008, 48: 1582.
- [24] Inoue H. Data augmentation by pairing samples for images classification [C]. ICLR, 2018.