* 1. **研究内容**

**高熵材料晶体结构多目标约束优化方法研究**

针对传统结构优化方法仅考虑能量最小化目标，难以同时兼顾高熵体系中原子占位序列演化、晶格畸变响应与熵驱动稳定机制的问题，研究一种高熵材料晶体结构的多目标协同优化方法。首先，构建一种基于熵稳定化能（熵值）和最低能量的多目标函数，进一步针对原子顺序变化、晶格畸变分别设计结构编码方式，通过动态捕捉高熵材料中多元素协同弛豫过程的能量-熵竞争机制，实现从亚稳态到稳定态的跨尺度结构搜索，最后研究设计一种全局搜索性能更优的多目标优化算法用于最优高熵材料结构搜索。

研究方案

**3.1.2 高熵材料晶体结构多目标约束优化方法**

本研究旨在提出一种针对高熵材料晶体结构的多目标约束优化方法，该方法将围绕三个核心方面展开：基于熵稳定化能与最低能量的多目标函数设计、原子顺序变化与晶格畸变的编码方案设计，以及高效的多目标优化算法设计。通过该方法，期望能够有效地探索高熵材料可能的晶体结构，并筛选出具有优异稳定性的候选结构。

* + **熵稳定化能与最低能量的多目标函数设计**

拟在多目标函数设计中，以最大化高熵材料的构型熵和最小化体系能量为双重优化目标。具体而言，目标函数将寻求一组在构型熵和体系能量两个维度上达到Pareto最优的解x。

其中，构型熵 将采用统计热力学中的玻尔兹曼熵公式进行计算，表达式为，式中 R 为理想气体常数，代表特定原子构型 x 中第 i 种元素的原子分数，此目标函数旨在实现最大化以体现高熵效应。

体系最低能量 主要通过第一性原理计算得到的材料形成能来表征，其计算表达式为 ，其中 是当前原子构型 x 的总能量， 是构成元素 i 在其稳定单质相的化学势能，此目标函数旨在实现最小化以确保结构的热力学稳定性。

因此，多目标函数可表达为最小化：

|  |  |
| --- | --- |
|  | (5) |

* + **原子顺序变化与晶格畸变的编码方案设计**

针对高熵材料化学成分复杂、原子排列多样以及可能存在的显著晶格畸变等特点，本研究将设计一种能够全面描述其结构特征的编码方案。一个候选的高熵材料晶体结构 S 可以被严谨地定义为一个三元组：。其中L代表晶格结构，由三个晶格矢量或等效的六个晶格参数描述。这部分编码直接反映了晶格的整体形状和尺寸，其相对于某个理想参考晶格的偏离即为晶格畸变的一部分。在编码中，这六个参数将作为连续变量。代表晶胞内 个原子的基础位置集合，记为，其中每个 且​∈[0,1)。这些原子坐标相对于其在高对称性理想位置 的偏离 也构成了晶格畸变的重要组成部分。这些分数坐标同样作为连续变量进行编码。O 代表原子占位序构，即上述个原子位点上具体的化学元素种类排布，记为，其中每个属于材料体系所包含的元素集 E= (M为元素种类数)。对于原子顺序，我们采用一个由元素标识符组成的序列对齐进行编码。

因此，优化算法中的每一个染色体都将包含这三部分信息：

|  |  |
| --- | --- |
| ​=, ,) | (6) |

原子顺序变化的特征主要由 O向量捕获和表示；晶格畸变的特征则由L参数和A中原子坐标相对于理想格点的偏离共同体现。这种编码方案能够清晰地将原子尺度的化学无序/有序及晶格整体/局部几何畸变区分开来，并为后续的多目标算法设计提供了直接的操作对象。

* + **改进NSGA-III多目标优化算法设计**

在多目标优化算法设计方面，考虑到高熵材料晶体结构优化问题的高维、多约束和多目标特性，本研究拟采用一种改进的NSGA-III算法。并结合上述定义的晶体结构编码方案 S=(L,A,O)。该算法能够有效地处理高维、多约束的优化问题，并通过引入参考点机制来保证解集在目标空间的分布性和多样性。

该研究采用一种针对高熵材料晶体结构优化的改进NSGA-III算法。算法以 S=(L,A,O) 编码的候选HEM结构种群及目标空间中的参考点作为起点。在进化过程中，特别设计的交叉与变异算子直接作用于结构的L、A和O编码，以探索多样的原子排布和晶格畸变，同时确保结构的化学与物理可行性。新结构与父代一同基于计算出的能量和构型熵进行评估，并通过非支配排序机制筛选，优先保留低能量、高构型熵的非支配解。NSGA-III独特的基于参考点的小生境保留策略，尤其在处理最后一个被部分接纳的非支配层时，能够确保帕累托前沿解的多样性与均匀分布，从而得到广泛代表能量与熵之间优化权衡的HEM结构集。针对HEM的特性，算法的改进将包括:开发保持晶体学与化学合理性的遗传算子，引入参考点自适应调整以适应HEM复杂的能量熵空间，以及集成局部搜索或代理模型提升效率与精度。

整个优化流程将紧密集成各个模块。首先，依据材料体系的元素组成和晶体学信息，利用S=(L,A,O)编码方案生成初始结构种群。随后，调用能量与构型熵计算模块评估各结构的多目标函数值。以此为基础，改进的NSGA-III算法通过迭代优化，运用精心设计的遗传算子操作个体编码，并结合约束处理机制生成满足物理化学约束的新候选结构，直至算法收敛于一组近似的帕累托最优解集。