

• 前沿进展 Research Progress •
DOI:10.16410/j.issn1000-8365.2026.5282

知识赋能-数据驱动的先进钛合金 智能设计与智能制造

樊晓倩^{1,2}, 王毅^{1,2}, 刘硕^{1,2}, 叶宏建^{1,2}, 张苏扬^{1,2}, 武雅洁^{1,2}, 李佩璇^{1,2}, 王军²

(1. 西北工业大学 中国-哈萨克斯坦材料基因工程与智能科学“一带一路”联合实验室, 陕西 西安 710072; 2. 西北工业大学 凝固技术全国重点实验室, 陕西 西安 710072)

摘要: 钛合金是航空、航天、海洋装备等关键领域的战略材料, 其传统研发模式因依赖“试错”而效率低下。人工智能(artificial intelligence, AI)的兴起正推动该领域向“数据与知识双驱动”的范式变革。本综述系统阐述通过知识与数据融合, 驱动先进钛合金实现从数据构建、性能预测到智能制造的全链条创新。首先剖析了 AI 带来的范式变革与全球战略背景; 其次, 分别阐述了在构建钛合金领域知识体系中的应用、机器学习在钛合金成分智能设计中的实现、机器视觉在智能焊接与质量调控中的支撑作用, 以及由 AI 智能体融合知识、数据与执行能力, 实现自主研发; 最后, 对钛合金自主化研发的未来路径进行展望。尽管面临数据、模型可解释性及产业集成等挑战, 未来通过推动数据-知识融合指导、自主实验室转化, AI 有望引领钛合金研发进入自主化新阶段, 为国家高端材料自主可控提供核心动能。

关键词: 人工智能; 钛合金; 机器学习; 智能设计; 智能制造

中图分类号: TG146.2+3; T-01

文献标识码: A

文章编号: 1000-8365(2026)09-0953-15

Knowledge-enabled and Data-Driven Intelligent Design and Manufacturing of Advanced Titanium Alloys

FAN Xiaoqian^{1,2}, WANG William Yi^{1,2}, LIU Shuo^{1,2}, YE Hongjian^{1,2}, ZHANG Suyang^{1,2},
WU Yajie^{1,2}, LI Peixuan^{1,2}, WANG Jun²

(1. China-Kazakhstan Belt and Road Joint Laboratory on Materials Genome Engineering and Intelligent Science, Northwestern Polytechnical University, Xi'an 710072, China; 2. National Key Laboratory of Solidification Processing, Northwestern Polytechnical University, Xi'an 710072, China)

Abstract: Titanium alloys are strategic materials in key fields such as aerospace and marine equipment. However, their traditional research and development (R&D) model, which relies heavily on trial and error, is inefficient. The rise of artificial intelligence (AI) is driving a paradigm shift in this field toward a "data and knowledge dual-driven" approach. This review systematically elaborates on how the integration of knowledge and data drives full-chain innovation in advanced titanium alloys, covering data construction, property prediction, and intelligent manufacturing. First, it analyses the paradigm shift brought by AI and the global strategic context. Second, the application of AI in constructing a titanium alloy domain knowledge system, the realization of machine learning in the intelligent design of titanium alloy compositions, the supporting role of machine vision in intelligent welding and quality control, and the achievement of autonomous R&D by AI agents integrating knowledge, data, and execution capabilities are discussed. Finally, the future path of autonomous R&D for titanium alloys is anticipated. Despite challenges such as data quality, model interpretability, and industrial integration, AI is expected to lead titanium alloy R&D into a new stage of autonomy through promoting data-knowledge

收稿日期: 2025-12-21

基金项目: 国家重点研发计划(2024YFE0213600); 西北工业大学凝固技术全国重点实验室基金(2025-BJ-02)

作者简介: 樊晓倩, 2000 年生, 硕士生. 研究方向为基于机器学习的钛合金成分设计. Email: xiaoqianfan2023@mail.nwpu.edu.cn

通信作者: 王毅, 1982 年生, 博士, 教授. 研究方向为极端条件先进材料的材料基因工程(MGE)& 集成计算材料工程(ICME).

Email: wywang@nwpu.edu.cn

李佩璇, 1996 年生, 博士后. 研究方向为基于第一性原理计算与机器学习的材料基因工程. Email: li_peixuan@nwpu.edu.cn

引用格式: 樊晓倩, 王毅, 刘硕, 叶宏建, 张苏扬, 武雅洁, 李佩璇, 王军. 知识赋能-数据驱动的先进钛合金智能设计与智能制造[J]. 铸造技术, 2026, 47(9): 953-967.

FAN X Q, WANG W Y, LIU S, YE H J, ZHANG S Y, WU Y J, LI P X, WANG J. Knowledge-enabled and data-driven intelligent design and manufacturing of advanced titanium alloys[J]. Foundry Technology, 2026, 47(9): 953-967.

fusion guidance and autonomous laboratory transformation, providing core momentum for the independent and controllable development of national high-end materials.

Key words: artificial intelligence; titanium alloys; machine learning; intelligent design; intelligent manufacturing

从第四代战机的高比例钛合金结构,到深潜器耐压舱体的特种钛合金应用,再到新一代高超音速飞行器所需的高温钛合金^[1-3],钛合金凭借其卓越的比强度、出色的环境适应性、良好的生物相容性以及优异的耐热性能,已成为航空航天、深海探测与生物医疗等关键领域的核心材料^[4-6]。它不仅被誉为“太空金属”,更被视为衡量国家高端制造能力与科技竞争力的战略资源。因此,面向极端环境与复杂工况,开发兼具高强度、高韧性、耐腐蚀与抗疲劳等综合性能的先进钛合金,已成为当前材料领域的重要研究方向。

钛合金研发面临 α/β 固态相变复杂、组织高度敏感、增材制造非平衡凝固难调控三大核心问题,其“成分-工艺-组织-性能”耦合关系远复杂于钢铁、铝合金,决定了 AI 技术在钛合金领域的应用需直面专属挑战,同时具备独特差异化价值。相较于传统合金,钛合金相变温度区间窄、织构对工艺参数敏感、多为多元复合体系,传统 AI 模型易因缺乏物理冶金知识约束出现预测失效。

传统上依赖“试错法”与经验迭代的研发模式,已难以适应全球科技竞争背景下对钛合金快速创新与性能精准调控的迫切需求。具体而言,一种钛合金从成分设计、试样制备到性能测试的单次研发周期通常长达 6~12 个月,高端航空航天用钛合金甚至需要 1~2 年时间;单一体系研发往往需开展 30~100 组实验,研发成本超百万元;而传统试错法对新型钛合金的筛选命中率不足 5%,往往需迭代数十次才能获得 1 组符合性能要求的配方。同时,传统研发中常用的从头计算、相图计算和分子动力学等经典计算方法,虽能从原子/分子层面分析合金性能,但模拟计算耗时可达 3~10 天,且难以兼顾成分-组织-性能的多尺度耦合关系,预测误差较大,无法显著加速新型钛合金的发现与筛选^[7-10]。

人工智能的迅猛发展为突破这一困境提供了革命性路径。材料基因组倡议(materials genome initiative, MGI)作为推动新材料高效、智能化发现与制造的重大计划,致力于通过理论、计算与实验的高度集成,实现从基础单元出发的通用材料开发新范式^[11]。集成计算材料工程(integrated computational materials engineering, ICME)则进一步融合多尺度建模、材料数据与工程仿真,支持数字孪生与智能制造范式,凸显了材料信息学在连接设计与制造中的

关键作用^[12-13]。AI 技术的深度融入,正成为实现 MGI 与 ICME 愿景的核心使能技术,推动钛合金研发从“实验试错”向“数据与知识双驱动”的模式转变。《Nature》曾报道机器学习从失败实验中挖掘新材料规律,准确率超越人类专家^[14]。基于实验数据构建的钛合金性能机器学习模型,能够高效筛选出同时具备低杨氏模量、高硬度、高抗压屈服强度与高断裂应变的多组分钛合金,机器学习与高通量分析方法结合,可以成为加速设计具备所需性质的多组分钛合金的强大工具^[15]。Zhang 等^[16]采用机器学习辅助设计,结合 NSGA-II 多目标优化算法,实现了低合金化 Ti-O 合金的高强度与高延展性协同优化。最终,通过实验验证了预测结果,并根据实验值调整数据集,重复设计过程以优化结果。Yao 等^[17]应用机器学习模型快速优化 Ti64 的 L-PBF 增材制造的加工参数,以在不进行后期热处理的情况下实现 Ti64 零件的强度和延展性之间的良好平衡。

在此趋势下,AI 赋能的 MGI 与 ICME 框架不仅强化了数据驱动与知识模型的融合,也为如钛合金等先进材料的智能设计与制造提供了全新的方法论支撑,引领材料科学进入知识驱动与数据智能并重的新时代^[18-19]。作为数据智能与知识工程的核心载体,AI 通过对多模态数据的深度挖掘与规律提取,实现了材料研发从“实验驱动”向“数据-知识双驱动”的跨越,其在钛合金领域的应用不仅能将工艺开发周期从“年”压缩至“月”,更能突破传统理论局限,实现性能协同优化的创新性设计。这种技术融合不仅是材料科学的方法论革新,更是全球科技竞争中构建钛合金产业技术壁垒的战略抓手,为我国在高温钛合金、高强韧钛合金等“卡脖子”领域实现弯道超车提供了可能。

基于上述背景与趋势,本文将系统阐述知识赋能与数据驱动在先进钛合金智能研发制造中的创新应用与前沿进展。首先,揭示了钛合金研发范式从实验驱动到数据驱动的演进脉络,AI 技术的迭代升级与意义。其次,总结了人工智能在先进钛合金设计与制造中的关键应用,包括大语言模型驱动的知识挖掘、机器学习辅助的成分设计、机器视觉赋能的智能制造与缺陷检测以及 AI 智能体支撑的自主实验等核心领域,这些技术为实现材料性能的优化与研发效率的跨越式提升奠定了技术基础。最后,对未来研究方向进行展望,旨在为知识赋能与数据驱动深度

融合的下一代钛合金材料设计与制造提供系统的理论参考与技术前瞻。

1 从人工智能兴起到钛合金研发范式变革

1.1 人工智能发展的背景及意义

人工智能的发展历经数个关键阶段,每一阶段均为其能力边界与应用范式带来深刻变革。演进脉络可概括为^[20]:早期探索阶段建立了基础理论;进入以专家系统和知识工程为核心的符号逻辑时代;随后迎来以神经网络和数据驱动范式为特征的连接主义与统计学习阶段;进而在大数据与算力突破的驱动下,迈入深度学习革命时期,以及当前的多模态整合阶段。每一次范式转变都反映了算法鲁棒性、可解释性和跨域适用性的迭代进步,同时也面临伦理对齐和人机协作的持续挑战。

在全球科技竞争聚焦于“硬科技”突破的背景下,“AI+新材料”已成为大国战略博弈的关键赛道,如图 1 所示。美国、欧盟、英国等主要经济体均推出国家级战略,虽路径各异,但核心均指向“数据驱动创新”。美国自 2011 年启动“材料基因组计划”,确立“计算工具-实验工具-数字化数据”三大平台架构,

旨在将先进材料研发周期缩短一半^[21]。2025 年,美国发布《赢得 AI 竞赛:美国 AI 行动计划》^[22]和“创世纪计划”^[23] 进一步提出整合国家实验室资源,构建“闭环 AI 实验平台”,目标是在 10 年内将科研创新生产力翻倍。欧盟 Materials 2030 路线图^[24]以“绿色转型与数字协同”为特色,通过构建标准化材料数据空间,推动 AI 在工艺优化与材料回收全链条的应用。英国的《人工智能赋能科学战略》^[25]明确将先进材料列为五大优先领域,推动自主实验室、AI 科学智能体在材料领域的应用。

聚焦我国发展实践, AI 技术已成为钛合金产业实现战略突围的关键抓手, 更是全球竞争中构建技术优势的核心导向。我国“人工智能+”行动凸显“产业赋能”与“自主可控”双重目标, 以 2024 年《新材料大数据中心总体建设方案》为支撑^[20], 构建“1+N”数据中心体系, 为 AI 赋能材料科学提供了全面的政策支持和技术保障, 通过 ALKEMIE 等自主智能平台^[27]实现“数据-算法-实验”闭环, 助力产业在高温钛合金、深海用钛合金等新兴需求领域抢占技术高地。各国战略布局的核心逻辑高度一致, 均通过 AI 赋能缩短材料研发周期、降低创新成本, 而我国借助这一技术红利, 正加速推动钛合金产业实现从“跟跑”

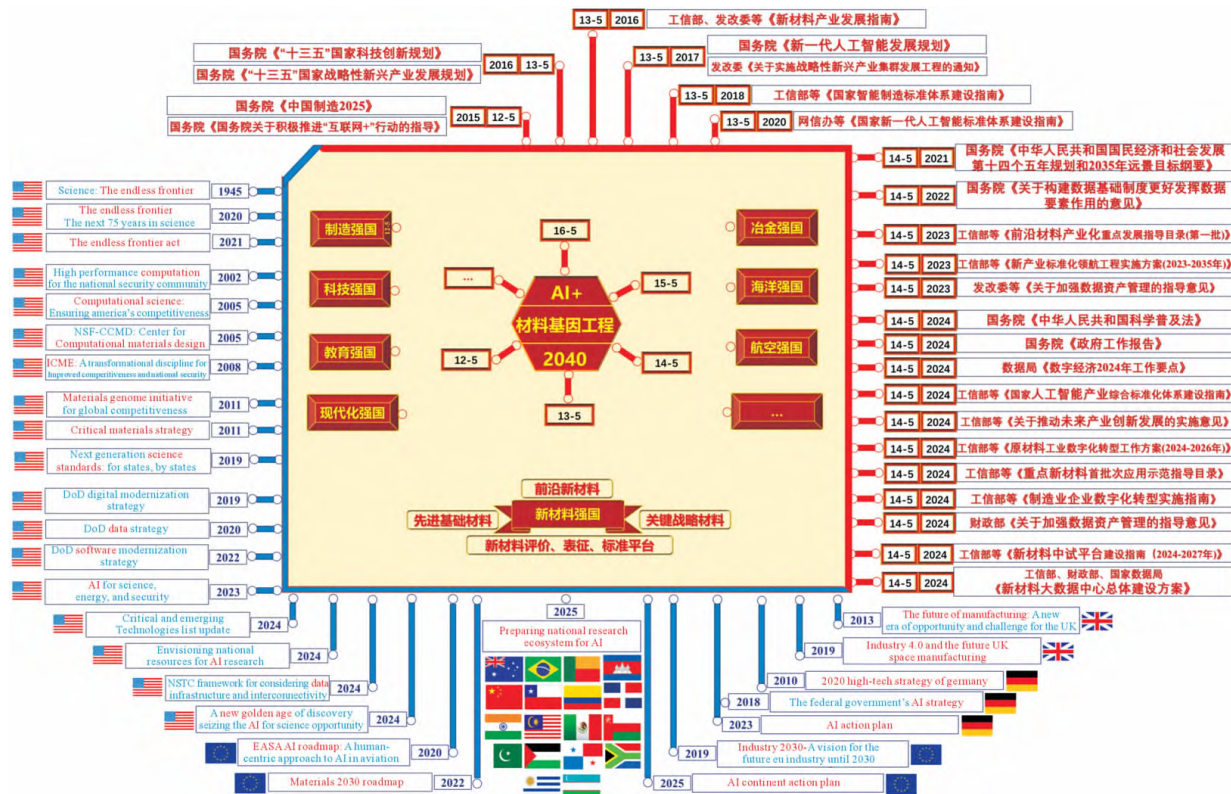


图1 “强国战略”驱动材料基因工程融合创新加速关键材料工程化的政策与行动纲要与我国人工智能发展与应用的战略规划路线^[18]

Fig.1 Policy and action outline for the “Strong Country Strategy” to drive the fusion and innovation of material genome engineering and accelerate the engineering of key materials and the strategic planning roadmap for the development and application of artificial intelligence in China^[18]

到“并跑”再到“领跑”的跨越式转变,为高端装备关键材料自主可控提供核心支撑。

1.2 人工智能技术的发展

人工智能是计算机科学的重要分支,专注于模拟和扩展计算机或机器中的人类智能,以实现环境感知、学习与推理、自主决策以及复杂问题的解决。其核心方法论——机器学习,尤其是近年来快速发展的深度学习,通过构建多层神经网络来自动识别数据中的层次化特征与隐藏模式,为解决高度非线性、机制不明确的复杂问题提供了强大工具^[28]。

人工智能技术的演进,始终与数据规模、算法创新和计算能力同步发展(图 2a)。从传统机器学习如决策树(decision tree, DT)、支持向量机(support vector machine, SVM)快速演进到以卷积神经网络(convolutional neural network, CNN)和长短期记忆网络(long short-term memory, LSTM)为代表的深度学习时代,并进一步向知识图谱、生成对抗网络(generative adversarial network, GAN)、Transformer 及大语言模型(large language models, LLMs)等前沿

技术拓展。传统机器学习方法为钛合金性能预测奠定了基础,例如, Sun 等^[29]通过梯度提升决策树和 XGBoost 算法成功预测 Ti-V-Cr 耐烧钛合金的抗氧化性,模型分析结果的趋势与实验结论相同,通过可解释性分析进一步揭示了元素含量和温度变化对抗氧化性的影响机制,验证了模型的有效性。生成对抗网络通过“生成-判别”对抗训练架构,为钛合金微观结构建模提供了新路径。Brayan 等^[30]提出生成对抗网络赋能的计算平台,以半监督学习模式实现复杂多晶钛合金的精准建模,减少对海量标注微观结构数据的依赖。依托 GAN 生成器-判别器的对抗训练架构,学习钛合金多模态微观结构的分布特征,综合真实电子背散射衍射(EBSD)图谱数据生成虚拟样本。

当前,以 Transformer 架构为核心的大语言模型标志着 AI 发展的新阶段。这类模型通过海量数据预训练、超大规模参数和自监督学习,展现出卓越的通用智能与涌现能力。无论是闭源的 GPT-4、Gemini, 还是开源的 LLaMA、DeepSeek 等模型,均能处理文本、图像乃至科学数据(如分子结构)等多种模态信

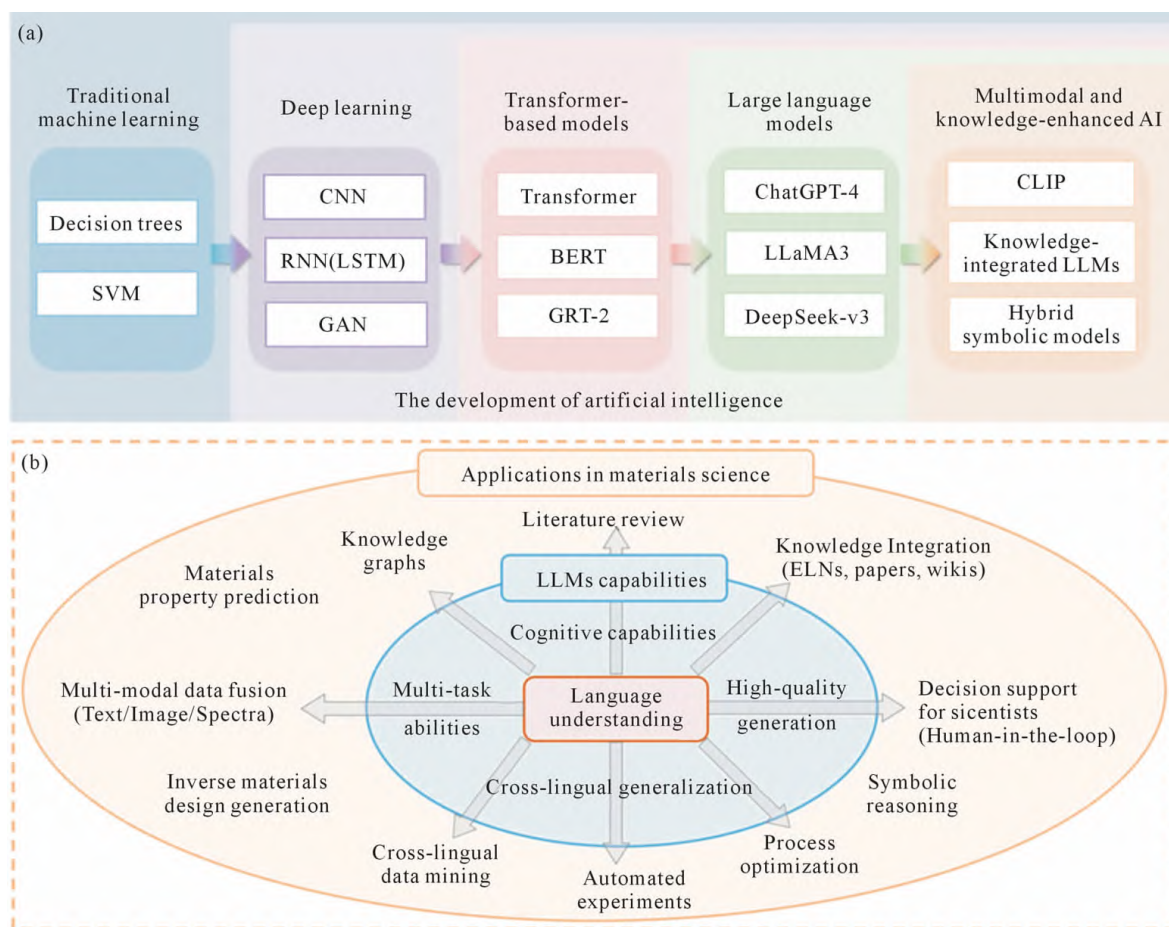


图 2 人工智能的发展:(a) 人工智能技术的演进脉络,从传统机器学习、大型语言模型到大规模多模态智能系统;(b) 大型语言模型在材料科学中的应用,涵盖文献解析、性能预测、数据挖掘、实验自动化与工艺优化^[28]

Fig.2 Development of artificial intelligence technologies: (a) evolution of artificial intelligence technologies, from traditional machine learning and large language models to large-scale multimodal intelligent systems; (b) applications of large language models in materials science, covering literature interpretation, property prediction, data mining, experimental automation, and process optimization^[28]

息。其关键优势在于将预训练获得的海量知识转化为强大的泛化与推理能力(图2b)。在材料科学领域,LLMs强大的跨模态信息处理和知识泛化能力展现出巨大潜力,例如在自动化实验室^[31]。其为解决复杂科学问题提供了新范式,包括成分设计、性质预测和工艺参数优化^[32-33],从而推动先进钛合金研究向数据驱动和智能方法的转变。Hao等^[34]研究表明,LLMs可辅助钛合金高速铣削工艺中未来刀具磨损预测,在长期时间序列预测方面表现出优越的能力,增强了模型的知识驱动能力和智能化。

1.3 从实验驱动到人工智能赋能:钛合金研发制造的范式演进

钛合金材料的研发历程,本质上是一场从“经验试错”到“理论指导”,继而迈向“计算仿真”,并最终走向“数据智能”的范式演进。这一过程的核心,在于通过多尺度数据融合、隐性知识显性化以及复杂关系建模,逐步实现材料设计的精准化、研发的敏捷化与决策的智能化。其演进脉络可划分为4个关键阶段,如图3所示。

最初,钛合金的传统研发模式本质上是基于“假设-实验-验证”的循环迭代过程,该方法高度依赖经验积累,难以透彻解析“成分-工艺-组织-性能”之间复杂的多场耦合关系,难以实现多目标性能的全局优化。如在钛合金增材制造中^[36],为改善延展性,传统途径主要依赖后处理热处理^[37]与成形工艺参数优化^[38]等方式,诱导 α' 马氏体分解为 $\alpha+\beta$ 双

相组织,但这往往以牺牲生产效率和成本为代价。尽管该模式在简单合金体系中尚可运行,但对于高温、高强韧等复杂钛合金体系,其研发效率与创新能力的不足日益凸显。

随着材料科学理论的成熟,研发进入第二范式,即通过热力学、动力学及相图计算等理论系统指导合金成分与工艺设计。然而,钛合金的复杂性使得开发准确且可推广的模型具有挑战性,这些模型往往严重依赖来自实验或微观计算的精确数据输入,其构建本身即是一项巨大挑战。

进入21世纪,计算能力的飞跃推动了第三范式的兴起。密度泛函理论、分子动力学等计算模拟方法得以广泛应用^[39-41],使在原子/介观尺度深入探究材料行为成为可能。尽管计算科学提供了前所未有的洞察,但仍未完全摆脱迭代试错的循环,且对专业知识和计算资源的要求极高。当面对含多种合金元素及复杂工艺的钛合金体系时,单纯依靠计算仍难以高效驾驭其多维度的性能优化空间。

如今,我们正全面迈入以数据为核心的第四范式。通过融合高通量实验、机器学习与人工智能技术,构建“成分-工艺-组织-性能”之间定量、可预测的关联模型^[42-44]。例如, Lee等^[45]开发的帕累托主动学习框架,将传统数月实验缩短至5轮迭代,突破Ti-6Al-4V合金强度-延展性权衡,实现1190 MPa抗拉强度与16.5%伸长率的协同优化。这种“数据驱动+理论约束”的新模式,既保证了创新的科学性,又

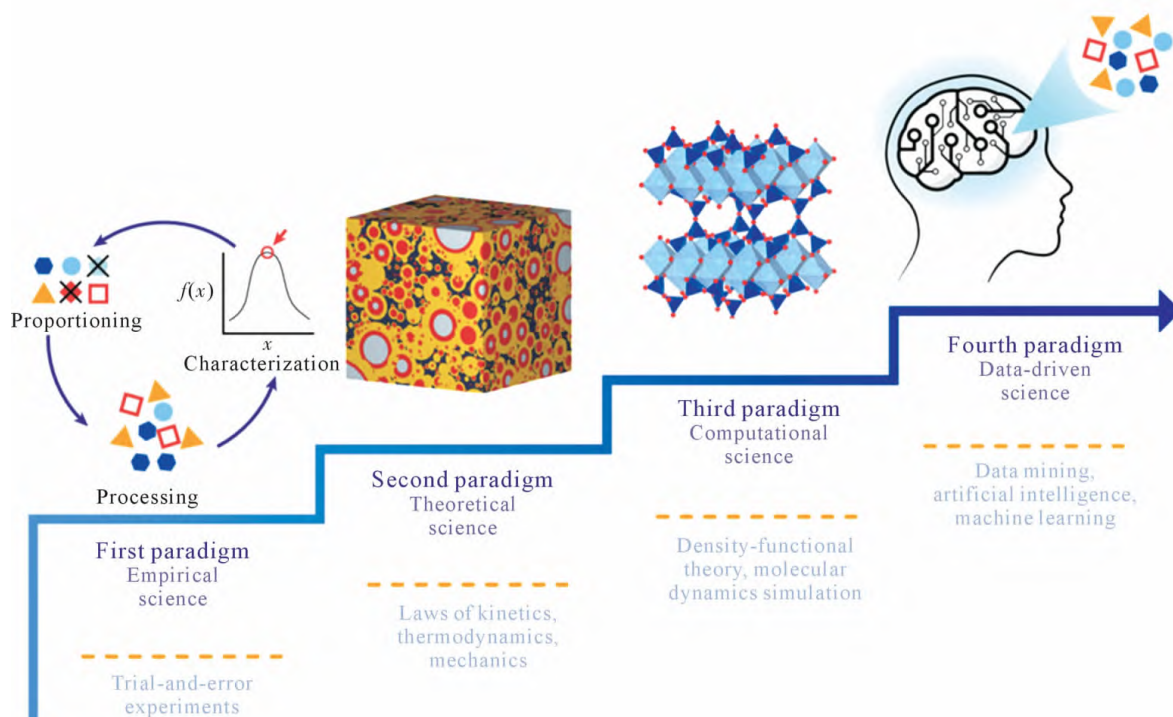


图3 具体科学的4种范式:经验、理论、计算和数据驱动^[35]

Fig.3 The four paradigms of science: empirical, theoretical, computational, and data-driven^[35]

提升了技术转化的效率,成为钛合金研发范式革命的核心特征。人工智能技术与钛合金材料科学的深度融合,核心目标为打破传统模式的瓶颈,实现钛合金材料性能与制造效率的双重突破。

2 人工智能在先进钛合金设计与制造的应用

2.1 基于大语言模型的钛合金领域知识挖掘

钛合金领域经过数十年的发展,积累了海量但分散的数据资源。这些数据多呈现为半结构化或非结构化的形式,如科研文本、交叉引用段落、图表说明及表格等,手动提取此类信息极其耗时且耗费资源,且依赖领域专家的解读。人工智能技术通过推动数据管理的标准化与利用文本挖掘实现知识提取,正将钛合金数据资源转化为体系化的知识资产,为后续的智能研发奠定核心数据基础。

材料领域专用语言模型的研发,成为实现钛合金知识精准挖掘的关键技术支撑,相较通用自然语言处理工具,其对钛合金领域专业信息的解析能力实现了质的突破。MatSciBERT 在 2850 万词的材料科学语料库中完成预训练,精准掌握了合金领域的专业术语、符号体系与逻辑关联,在钛合金文献内容识别、成分-性能关系分类等任务上的性能显著超越通用科学语言模型^[46]。Ni 等^[47]开发了生成式合金专用语言模型 AlloyGPT,将分散的合金物理数据(成分、结构、性能、工艺等)转化为结构化文本表示,为合金的正向性能预测与逆向设计提供统一的语言输入格式,为钛合金知识挖掘与智能设计搭建了直接的技术桥梁。

这些成熟的 NLP 技术与专用语言模型及其标准化文本处理方案,已成功应用于钛合金领域的知识挖掘实践。例如,Wang 等^[48]基于 Transformer 架构的 LLM,从 4.6 万篇钛合金文献中自动学习成分特征,生成并优化得到高维核心描述符,所建模型对钛合金关键性能的预测精度远超传统方法,还能通过多模态数据融合能力整合钛合金多源异构信息,构建全链条关联的材料知识图谱。相较于人工构建描述符的传统方式,该框架依托 LLM 实现了描述符的自动化生成,大幅减少人为干预与主观偏差,所获增强型泛化描述符适配多种性能指标与回归算法,性能显著优于传统描述符;同时结合领域知识与全局优化算法,打造了钛合金筛选流程,成功实现其竞争性性能的协同提升,且经实验验证了推荐合金的可靠性。LLM 所具备的多模态数据融合能力,使其能够协同整合文献、专利、实验记录与仿真结果

等多源信息,进而构建更为全面且关联紧密的材料知识图谱^[33]。

基于大语言模型的钛合金领域知识挖掘,正系统性地破解该领域长期存在的知识转化难题,构建起从“文本数据”到“结构化知识”的自动化、精准化专属路径。展望未来,通过持续优化钛合金领域定制化 LLM 模型,深化其对钛合金相变规律、冶金机制、织构演化等核心领域知识的学习与挖掘能力,将进一步提升钛合金知识提取的精准度与深度。同时,推动 LLM 与钛合金大数据管理技术的深度融合,将实现钛合金数据管理从依赖专家经验的传统模式,全面转向以数据驱动和知识赋能为特征的智能化管理新模式,从而为钛合金研发与制造的智能化奠定坚实可靠的数据与知识基础。

2.2 基于机器学习的高性能钛合金成分设计与性能预测

在钛合金研发中,成分设计是决定其最终性能以满足特定应用需求(如高温、高压、耐腐蚀)的核心迭代过程。传统方法严重依赖试错与经验,效率低下。AI 技术的引入,通过构建“成分-结构-性能”的正向预测模型与逆向设计算法,正驱动钛合金研发实现从“正向试错”到“反向定制”的智能范式转变。在正向预测层面,该技术通过构建多维度材料描述符与机器学习模型,实现了从成分到性能的高效、精准预测;在逆向设计层面,则结合智能优化算法,完成了从目标性能到最优成分配方的直接转化与快速筛选^[49]。这两个层面的能力协同作用,系统性打破了传统依赖经验的研发瓶颈,极大地提升了高性能钛合金的研发效率与创新成功率。

AI 驱动的成分设计正向预测主要涵盖特征工程、模型构建与性能预测 3 个关键环节。其首要基础是构建多维度材料描述符,以实现成分-性能关系的全面量化表征:基于元素周期表属性的组成型描述符(如电负性、原子半径差)、基于晶体结构的结构型描述符(如晶格常数、堆垛层错能),以及基于第一性原理计算的能量型描述符(如形成能、结合能),实现对成分-性能关系的全面量化表征。将数据挖掘与机器学习结合,也被证明是设计高强度、高韧性钛合金的创新方法^[50]。通过高通量第一性原理计算了电子功函数 ϕ 、晶格畸变能、键电荷密度和费米能量在内的 4 种电子性质。随后,利用 Hall-Petch 和 ϕ 模型来量化固溶强化和细晶强化的贡献。SVM 模型的预测性能得到了显著提升,以 ϕ 作为输入特征,表明固溶强化在提升合金强度中起着主导作用。新兴的高通量热力学算法通过在领域知识(如

[Mo]_{eq}与[Al]_{eq}引导下构建“等效相图”,可借助简化的三元体系(如Ti-Al-Mo)快速、精准地评估复杂多元钛合金的相变温度、相分数等关键热力学描述符。高通量计算为机器学习模型输出了兼具物理意义与高保真度的关键输入特征,从而用于钛合金成分设计和工艺(图4)^[51]。

在正向性能预测方面,机器学习模型展现出强大的建模与优化能力。对于高温钛合金、钛铝金属间化合物等复杂体系,深度学习模型展现出更强的泛化能力,CNN模型构建“特征输入-卷积提取-池化降维-全连接映射”,将多维度特征重构为“特征矩阵”,CNN模型在测试集上的 R^2 达0.94,在600℃蠕变寿命预测与实验误差仅为2.3%,显著缩短钛合金高温部件研发周期^[52]。Pan等^[53]采用支持向量回归

与随机森林集成算法构建“成分-变形机制-性能”关联模型,实现 β 型钛合金强塑协同性能的精准预测与优化,推荐的Ti-15Zr-15Nb-1Fe合金实测性能与预测值高度吻合。为应对钛合金成本高昂的问题,亦有研究融合机器学习与改进的穷举法,实现了低成本、高性能钛合金的快速设计。该方法通过选用经济型合金元素替代昂贵组分,在显著降低原材料成本的同时,仍使合金保持优异的力学性能,流程如图5^[54]。这类工作为高效开发高性能合金提供了新的技术路径。

值得关注的是,除了常规的静载性能,钛合金在冲击载荷下的动态力学行为对其在防护、航空等领域的应用至关重要,而动态性能与基本力学性能之间的关联往往不甚明确。针对Ti20C板材,Gong等^[55]

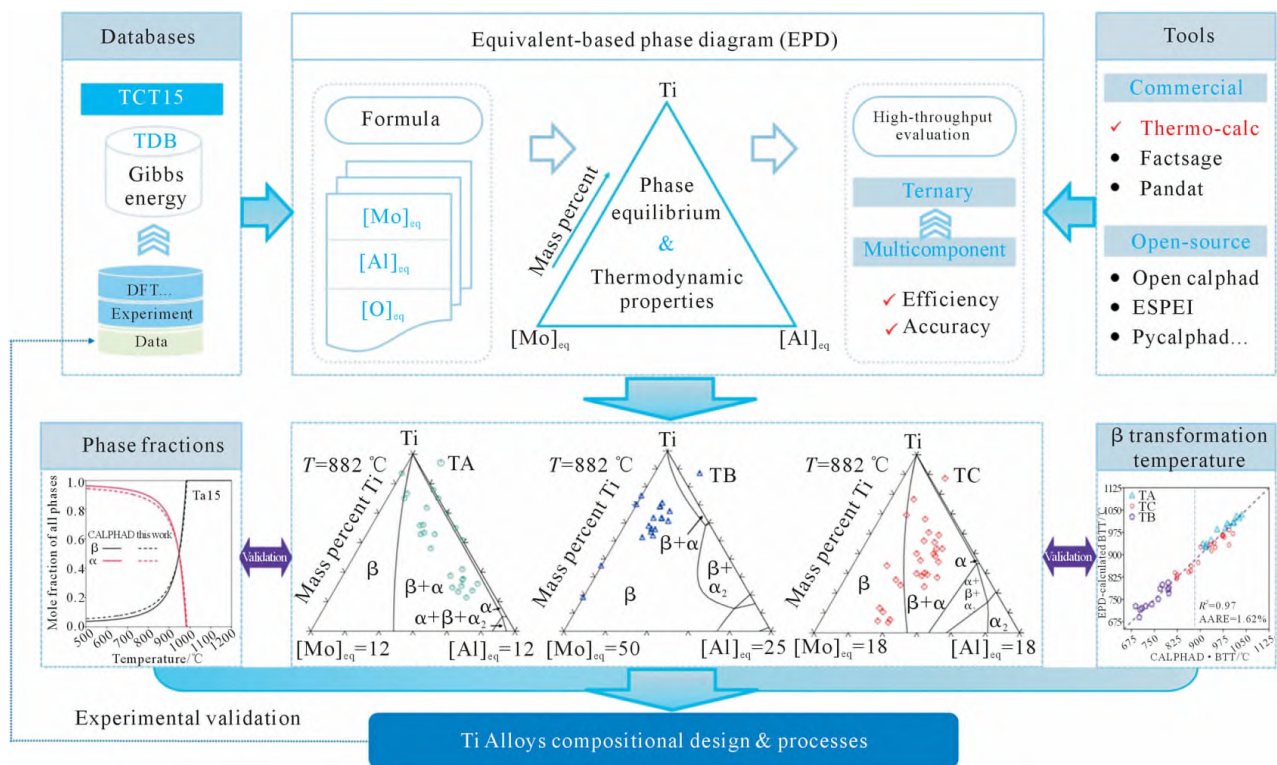


图4 基于知识引导等效当量相图的钛合金高通量计算框架^[51]

Fig.4 High-throughput computing framework for titanium alloys based on knowledge-guided equivalent phase diagrams^[51]

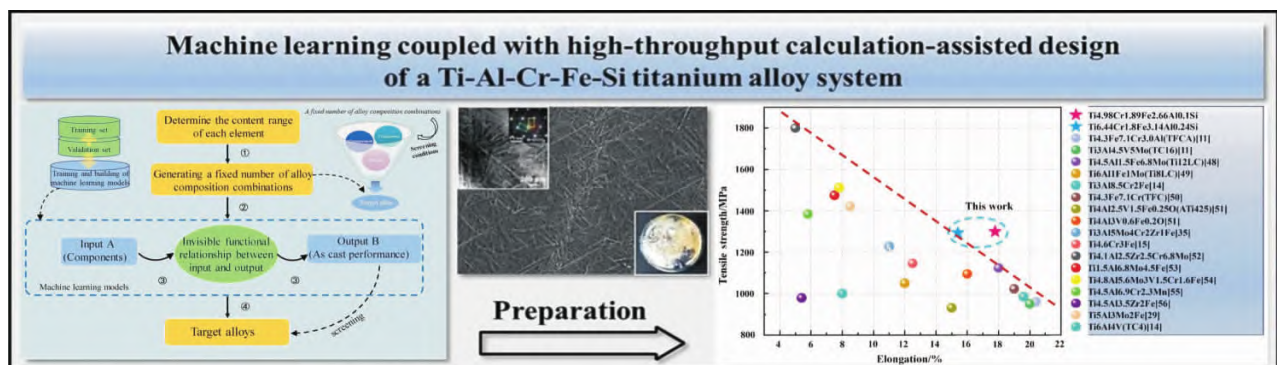


图5 结合机器学习与新型合金成分计算方法结合的钛合金设计流程示意图^[54]

Fig.5 Schematic diagram of the titanium alloy design workflow integrating machine learning and a novel alloy composition calculation method^[54]

基于 4788 组力学性能数据,通过数据驱动和机器学习方法构建它们之间的相关性(图 6)。通过训练好的随机森林回归模型,构建 Quantitative Maps,动态抗压强度,临界断裂应变,以及冲击吸收能量,均得到有效预测,准确率均超过 86.11%。据此,可以快速筛选出 Maps 中动态性能优异的区域和对应的准静态拉伸性能。通过将预测值与实验值进行比较,发现该模型对其他钛合金的动态压缩性能实现了相对准确的预测。通过机器学习挖掘性能间隐藏的关联规律,能够为钛合金的动态性能设计与优化提供新的数据驱动视角,尤其在缺乏大量高成本动态实验数据时,该方法显示出重要的补充价值和效率优势。

针对上述应用于钛合金成分-性能预测的各类机器学习方法,其在钛合金研发场景中的适用条件、性能表现与优劣特征存在显著差异,需结合实际研究需求针对性选择。SVM 在小样本、高维特征的非线性拟合问题中表现稳健,对钛合金小众体系的性能预测适配性较强,但模型效果对核函数选择与参数调优高度敏感,且海量数据处理效率偏低。随机森林(random forest, RF)、XGBoost 等集成学习方法,能够高效处理多特征耦合的建模需求,可量化评估各成分、工艺特征对钛合金性能的贡献度,且相较单一模型更不易过拟合,是当前钛合金成分-性能关联

建模中应用最广泛的工具。但其预测效果易受数据噪声干扰,对极端成分的钛合金体系拟合精度有限。CNN 等深度学习方法,具备自主挖掘高维特征、捕捉时空关联规律的能力,在处理与微观结构、熔池演化相关的图像或序列数据时优势突出,却对大规模标注训练样本要求严苛,且模型呈“黑箱”特征,物理可解释性较差,难以追溯成分与性能的内在关联逻辑。因此,在钛合金性能预测的实际应用中,需依据研究的数据规模、特征类型、预测任务目标综合选定适配算法,建模过程中需通过交叉验证、正则化等方式规避过拟合风险,保障模型的泛化能力;同时,样本覆盖的全面性、特征表征的准确性等数据质量要素,直接决定模型预测的可靠性,要求建模前开展精细化的特征工程与数据清洗工作,剔除异常值、补全缺失特征,实现实验数据与计算数据的标准化整合,为模型构建奠定高质量数据基础。

逆向设计算法的应用则实现了“性能需求→成分配方”的直接转化,成为成分设计的核心创新点。通过将钛合金的强度、延展性、耐腐蚀性等目标性能输入模型,结合遗传算法、粒子群优化等智能优化算法,在成分可行域内快速筛选出满足多目标约束的最优配方。例如, Li 等^[56]融合机器学习(MLP 模型)与遗传算法(genetic algorithm, GA),基于性能互补与

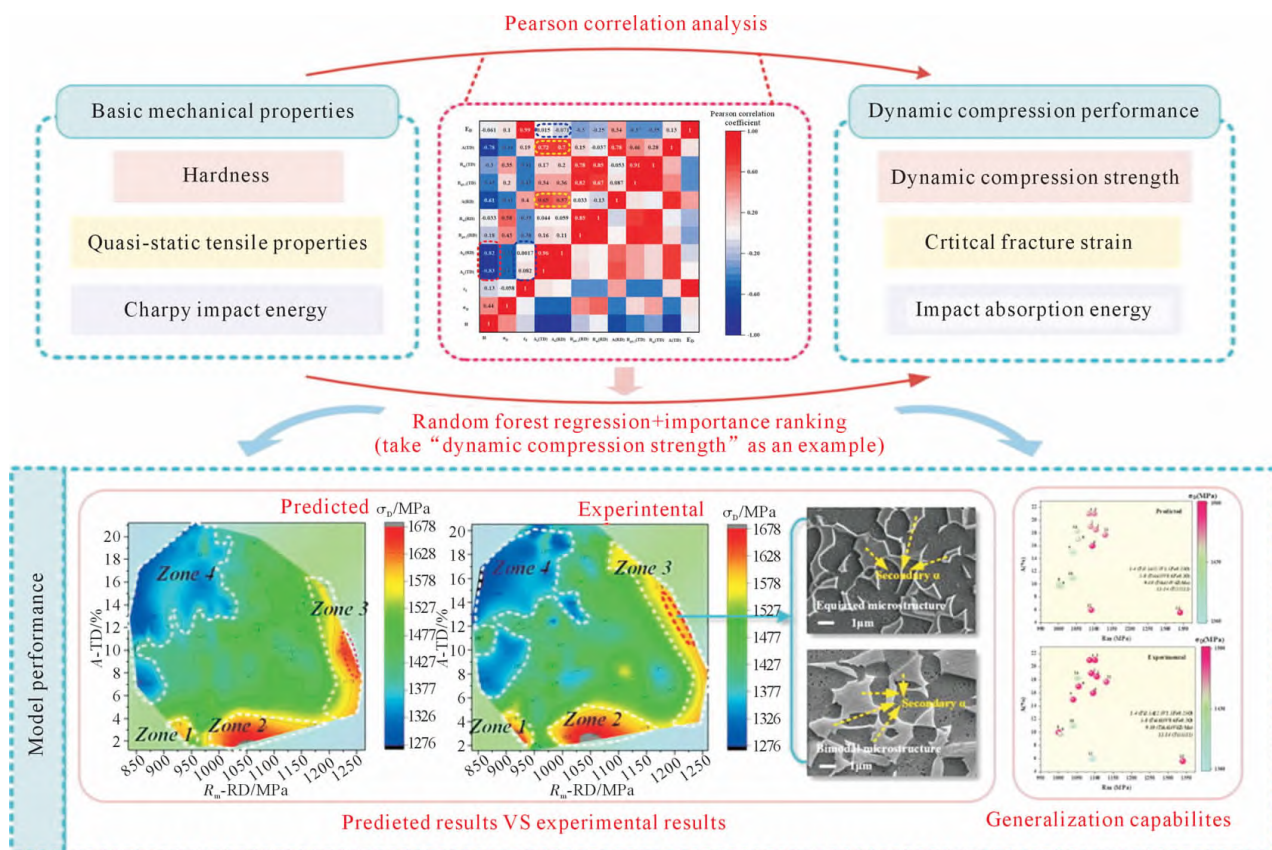


图 6 基于机器学习构建钛合金基本力学性能与动态压缩性能间关联的框架示意图^[55]

Fig.6 Machine learning-based integrated composition design framework^[55]

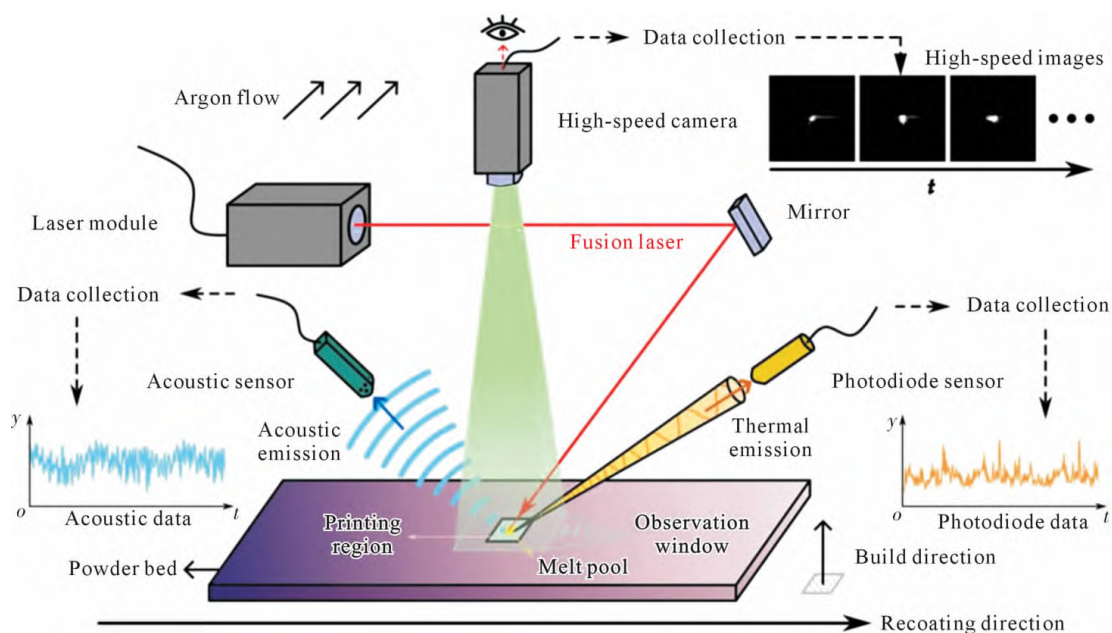


图 8 基于声学 and 热发射数据的激光粉末床聚变中高分辨熔池视觉特征预测的传感器布置^[59]

Fig.8 Sensor arrangement for high-resolution melt pool visual feature prediction in laser powder bed fusion based on acoustic and thermal emission data^[59]

软件层面的性能提升则主要围绕两个思路展开:①通过图像处理算法增强采集的熔池图像纹理清晰度与特征显著性;②改进图像分类模型以提高计算效率与识别精度。早期的钛合金加工自动化缺陷识别主要采用卷积神经网络。随着 Transformer 架构在自然语言处理领域的成功,基于 Transformer 的视觉模型得以发展。Zhi 等^[60]提出了一种基于启发式快速区域卷积神经网络的方法,用于识别钛合金焊缝缺陷。通过设计缺陷测试试块并采用不同频率的探头,构建了超声衍射时差法焊缝缺陷检测数据集,构建了基于快速区域卷积神经网络的深度学习网络模型。该方法可实现缺陷类型识别准确率超过 92%,尤其在裂纹或未熔合缺陷的检测中表现突出。

为满足智能加工平台对在线缺陷监测的实时性要求,研发低成本、低功耗、高实时性的轻量化检测算法成为重点。Zhang 等^[61]设计了一个新模型 ConvNeXt,结合卷积神经网络和视觉变换器(ViT)的优势,用于识别焊接缺陷。基于迁移学习方法的预训练 ConvNeXt 经过 500 次训练后,分类准确率可达 99.52%,而 MobileNetV2 和 ResNet34 的传统 CNN 分别达到 85.94%和 93.41%。值得注意的是,大型语言模型被用于自动化编程以识别焊接缺陷,包括 ChatGPT 3.5、Bing Copilot、Claude3 和 ERNIE Bot。应用 LLM 辅助自动化编程技术开发图像缝合程序,实现多张焊接组织图像的无监督自动缝合,并获得清晰和广视场的焊接图像,流程如图 9。这些基于大型语言模型的深度学习技术和自动化编程案例研究,为非平

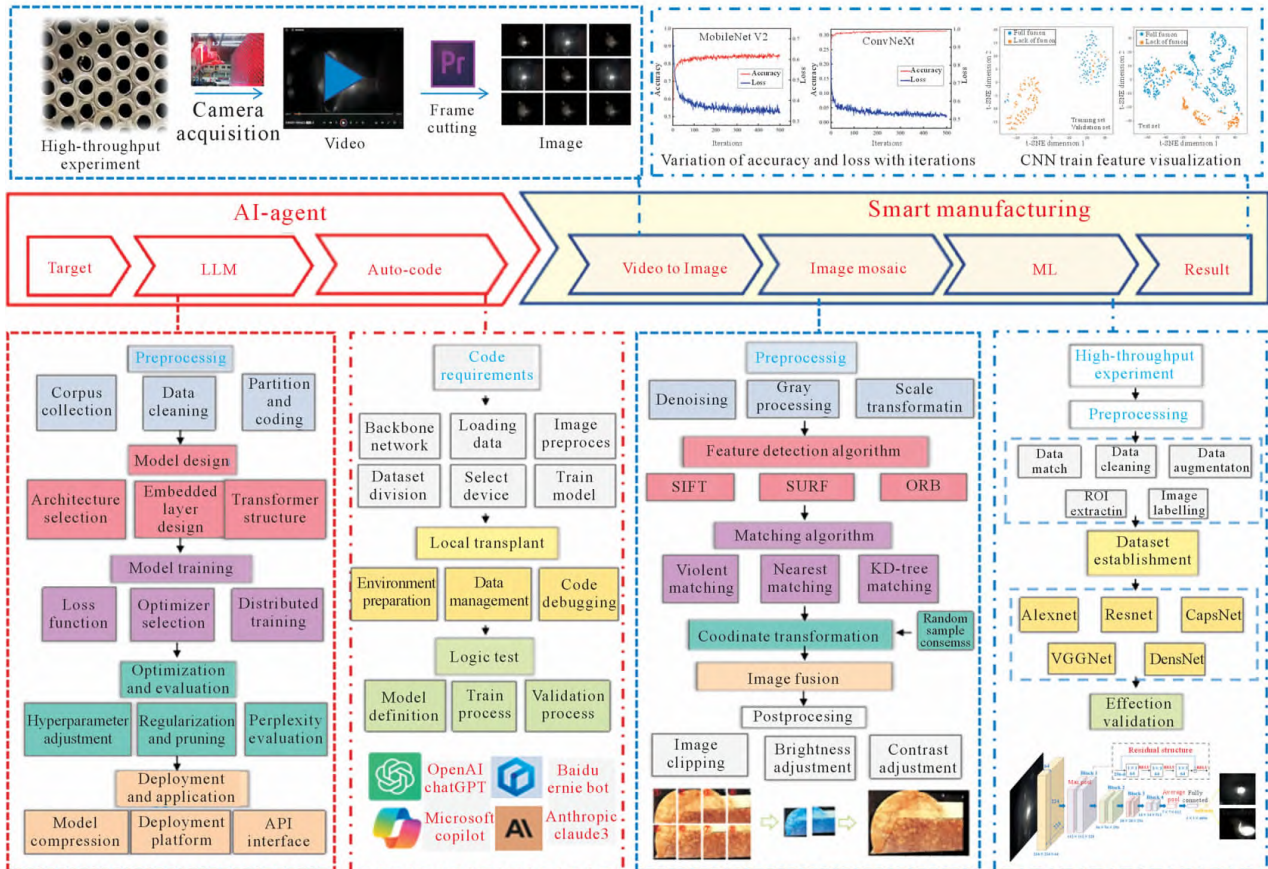
衡固化期间的智能焊接缺陷识别奠定了坚实基础。

当前,钛合金焊接缺陷智能检测技术正朝着高实时性、强特征判别性、轻量化与嵌入式部署,以及面向复杂场景的自适应多尺度检测等多个方向快速发展。这些方法通过架构创新、模块优化与任务定制,显著提升了检测的准确性、速度与适用性。未来,结合钛合金材料特有的焊接缺陷特征,进一步构建大规模高质量的专用数据集,并探索跨模态检测与小样本学习等前沿技术,将是实现钛合金智能制造全流程、全生命周期质量精准感知与闭环控制的关键。此外,该套技术框架可进一步迁移适配于钛合金增材制造、热加工等其他智能制造场景,为钛合金全工艺链质量管控提供通用化的智能检测解决方案。

2.4 基于 AI 智能体的钛合金研发自主实验室

钛合金实验依赖科研人员手动操作,存在效率低下、操作误差大、实验方案缺乏动态调整能力等问题,尤其在高通量实验场景中,人工操作难以满足“多变量、多重复”的实验需求以大型语言模型为技术基座的智能体(Agent)的快速发展,正为加速从传统自动化向真正智能化的实验与制造范式转变提供了关键路径^[62]。智能体是一种能够自主感知环境、进行决策并执行任务的计算系统,其核心特征在于拥有自主性、适应性、协作与学习能力,使其能够通过与物理环境的交互并依据反馈形成闭环迭代^[63]。

AI 智能体在钛合金领域的应用,必须针对钛合金的材料特性进行定制化设计。典型的技术架构采用“强化学习+专家系统”的混合架构:专家系统负

图9 钛合金管对管片智能焊接技术路线图^[61]Fig.9 Technical roadmap for the intelligent welding of titanium alloy tubes to tube sheets^[61]

责嵌入钛合金领域的相图规律、合金化原理等先验知识,确保决策的科学性与可靠性;而强化学习则通过持续分析实验反馈数据,不断优化决策策略,以提升方案的精准性与适应性。例如,麻省理工学院团队开发的合金成分设计智能体^[64]具备多源数据整合、多模态图像分析与跨尺度关联能力,其系统包含3大模块^[65]:大脑、感知和行动,为钛合金智能研发提供了可借鉴的架构范式。

在钛合金焊接领域,AI智能体已展现出实际应用价值。基于LLM的智能微观结构优化和焊接钛合金缺陷分类包括LLM、通过AI代理自动编码、图像处理、图像拼接和机器学习用于焊接缺陷检测^[61],如图10。这类技术克服了传统方法依赖人工选择特征的困难,实现了特征的自动提取与高效识别,不仅提升了检测的准确性与效率,也为工艺优化提供了实时反馈,彰显了智能体在推动材料智能制造方面的实际潜力。

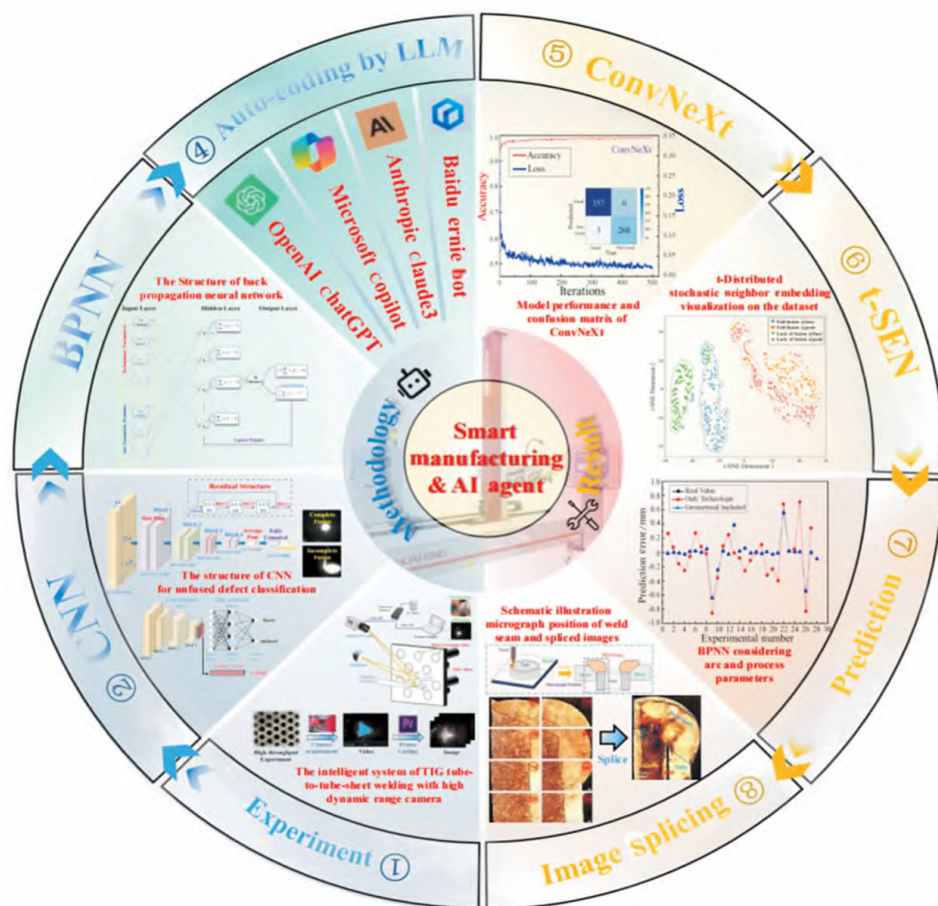
在钛合金成分设计与工艺优化方面,国内已有成功实践。攀钢成都材料院通过整合历史数据与物理模型,构建了涵盖近百万数据点的钛合金成分-性能虚拟空间,在高铁钛合金转向架材料的研发中,该系统仅用一周时间便从上万种候选成分中筛选出

6个最优配方,将后续实物试制周期压缩至一个月,研发实验批次从传统的约200次大幅降至20次内^[66]。这一实践虽未实现全流程硬件自动化,但充分验证了数据驱动与智能算法在压缩钛合金研发试错周期、实现高性能目标精准导向方面的巨大价值,为构建全闭环自主实验系统奠定了坚实的逻辑基础。

将自主实验室范式成功迁移并定制用于钛合金研发,仍需攻克一系列领域特有的科学与技术挑战。

①知识模型与决策逻辑的深度融合。钛合金的性能高度依赖于复杂的固态相变、织构演化及热处理方式,因此其决策智能体必须深度集成钛合金专用的热力学相图数据库、相变动力学模型、本构关系以及“成分-工艺-组织-性能”全链条关联知识图谱,而非依赖通用的化学合成经验。这要求发展知识赋能和数据驱动的智能模型,从而在复杂高维空间中进行可靠预测与决策。

②自动化硬件平台的重构与适配。钛合金的制备流程(如真空熔炼、塑性变形、热处理)与表征需求(如微观组织、力学性能)远复杂于粉末固相合成。未来的硬件平台需集成特种自动化设备,如惰性气氛保护下的自动熔炼站、机器人辅助的锻造/轧制单元、可控气氛热处理线,以及高通量的金相制备、显微组织分析与力学测试系统,形成覆盖

图 10 大语言模型实现了焊接钛合金的智能微观结构优化和缺陷分类^[61]Fig.10 Large language models enable intelligent microstructure optimization and defect classification of welded titanium alloys^[61]

“熔炼-加工-处理-表征”的完整自动化链条。③优化目标的多元化与闭环复杂性。钛合金研发是典型的多目标、多约束优化问题,需同时权衡强度、塑性、韧性、疲劳等多重性能指标。自主实验系统必须能在“成分-工艺-组织-性能”的多维空间中,运用多目标优化算法(如帕累托前沿搜索)驱动实验闭环。这不仅需要智能体精准预测性能,还需能理解并权衡各性能指标间的竞争关系,从而制定出满足复杂工程需求的优化策略。

通过发展“领域知识增强的 AI 智能体”与“钛合金工艺赋能的自动化硬件”,构建兼具科学洞察力与工程执行力的专用自主实验室,将成为突破钛合金研发效率瓶颈、实现性能定向设计的关键。

3 结论与展望

钛合金作为关乎国家高端装备发展的战略材料,其研发范式正在全球范围内经历一场由人工智能驱动的深刻革命。当前,以数据与知识双轮驱动,实现“成分-工艺-性能”一体化设计与短流程开发,已成为突破传统研发瓶颈、加速高性能钛合金创新的核心路径。从 LLM 辅助的数据自动化提取,到机

器学习驱动的成分智能设计与多目标性能优化,再到机器视觉赋能的在线质量监控与工艺闭环调控,发展 AI 驱动的自主实验,成为航空航天钛合金创新制造的有力工具。展望未来,为应对数据质量、模型可解释性及产业集成等挑战,需聚焦以下路径推动钛合金研发向自主化跃升。

(1)数据层面的标准化与共享机制缺失是首要瓶颈。当前数据存在格式异构、语义割裂、产权壁垒 3 大问题,亟需建立钛合金数据描述标准,统一元素符号、工艺参数与测试规范,发展 NLP 自动标注技术提升文献挖掘效率,建立高质量、标准化、覆盖“成分-工艺-组织-性能”全链条关联的钛合金专用数据库,持续推进高质量、标准化、全生命周期钛合金数据库的建设,并利用 AI 等技术在保障安全的前提下促进数据共享。

(2)模型层面的可解释性与外推能力不足制约工业应用,表现为“黑箱”模型难以满足航空航天领域的信任要求,外推误差大、物理一致性缺失、决策不透明。发展“物理约束+数据驱动”的新一代模型,发展融合领域知识的混合 AI 模型,应用 AI 技术揭示决策依据,建立分级验证机制确保安全冗余,提升

对钛合金复杂相变与性能关系的预测可靠性及外推能力。

(3)产业层面的实验室到产线转化路径不清,存在实时性不足、环境适应性差、验证标准缺失三大障碍,打造开放式钛合金智能研发平台,集成设计、模拟、制造与检测功能,推动“成分设计-工艺优化-性能验证”闭环协同,并建立相关技术、数据与评价的共性标准。以数据与知识双驱动推动技术突破与产业融合,实现钛合金研发模式颠覆性变革,必将引领钛合金研发进入一个效率倍增、性能可控的新时代。

参考文献:

- [1] 刘世锋,宋玺,薛彤,马宁,王岩,王立强. 钛合金及钛基复合材料在航空航天的应用和发展[J]. 航空材料学报, 2020, 40(3): 77-94.
LIU S F, SONG X, XUE T, MA N, WANG Y, WANG L Q. Application and development of titanium alloys and titanium matrix composites in aerospace field[J]. Journal of Aeronautical Materials, 2020, 40(3): 77-94.
- [2] GUPTA J, ARORA A, SINGH J. Advances in high-temperature deformation of titanium alloys: Experimental and modeling aspects for industrial applications[J]. Materials Science and Engineering: A, 2025, 948: 149295.
- [3] 陈子勇,刘莹莹,靳艳芳,马小昭,柴丽华,崔亚鹏. 航空发动机用耐 650 °C 高温钛合金研究现状与进展[J]. 航空制造技术, 2019, 62(19): 22-30.
CHEN Z Y, LIU Y Y, JIN Y F, MA X Z, CHAI L H, CUI Y P. Research status and progress of 650 °C high temperature titanium alloy for aero-engine[J]. Aeronautical Manufacturing Technology, 2019, 62(19): 22-30.
- [4] RODRIGUES J F Q, SANGALI M, PRANDI G V, VALENTIM M, STARCK L F, CAMPO K N, SOYAMA J, CARAM R. Tailoring strength and ductility in Ti-5553/Ti-42Nb layered heterostructures produced by laser powder bed fusion[J]. Additive Manufacturing, 2025, 114: 105033.
- [5] MAO Y M, ZHAO Q Y, ZHANG R Q, GUO P, CHEN Y N, ZHAO Y Q. Trifunctional local-range order oxygen structure enhanced strength-ductility and fatigue resistance in large-scale metastable titanium alloy[J]. Nature Communications, 2025, 16: 7168.
- [6] ZHU Y M, ZHANG K, MENG Z C, ZHANG K, HODGSON P, BIRBILIS N, WEYLAND M, FRASER H L, LIM S C V, PENG H Z, YANG R, WANG H, HUANG A J. Ultrastrong nanotwinned titanium alloys through additive manufacturing[J]. Nature Materials, 2022, 21: 1258-1262.
- [7] VENKATESH V, FURRER D, BURLATSKY S, KAPLAN M, ROSS A, BARKER S, MCCLURE M. New paradigms in model based materials definitions for titanium alloys in aerospace applications[J]. Integrating Materials and Manufacturing Innovation, 2024, 13: 843-856.
- [8] ZHOU K C, YANG X Y, AN Y X, HE J Y, WANG B F, ZHANG X Y. A review on advances of high-throughput experimental technology for titanium alloys[J]. Transactions of Nonferrous Metals Society of China, 2024, 34(11): 3425-3451.
- [9] SIONY N, VUONG L, LUNDAAJAMTS O, KADKHODAEI S. Computational design of corrosion-resistant and wear-resistant titanium alloys for orthopedic implants[J]. Materials Today Communications, 2022, 33: 104465.
- [10] LI J, LU W N, LIU L, HUANG S, JI M, ZHAO Y J. Molecular dynamics simulation of microstructural evolution and mechanical behavior of titanium alloy subjected to laser shock peening[J]. Optics & Laser Technology, 2024, 175: 110748.
- [11] XU Y J, LIU X, CAO X, HUANG C P, LIU E K, QIAN S, LIU X C, WU Y J, DONG F L, QIU C W, QIU J J, HUA K Q, SU W T, WU J, XU H Y, HAN Y, FU C G, YIN Z G, LIU M, ROEPMAN R, DIETMANN S, VIRTA M, KENGARA F, ZHANG Z, ZHANG L F, ZHAO T L, DAI J, YANG J L, LAN L, LUO M, LIU Z F, AN T, ZHANG B, HE X, CONG S, LIU X H, ZHANG W, LEWIS J P, TIEDJE J M, WANG Q, AN Z L, WANG F, ZHANG L B, HUANG T, LU C, CAI Z P, WANG F, ZHANG J B. Artificial intelligence: A powerful paradigm for scientific research[J]. Innovation, 2021, 2(4): 100179.
- [12] WANG W Y, ZHANG S Y, LI G N, LU J Q, REN Y, WANG X C, GAO X Y, SU Y J, SONG H F, LI J S. Artificial intelligence enabled smart design and manufacturing of advanced materials: The endless frontier in AI+ era [J]. Materials Genome Engineering Advances, 2024, 2(3): e56.
- [13] GAO X Y, WANG W Y, CHEN X, CHONG X Y, XIAN J W, TIAN F Y, WANG L F, CHEN H J, LIU Y, HUANG H B, SONG H F. ProME: An integrated computational platform for material properties at extremes and its application in multicomponent alloy design [J]. Materials Genome Engineering Advances, 2025, 3(3): e70029.
- [14] RACCUGLIA P, ELBERT K C, ADLER P D F, FALK C, WENNY M B, MOLLO A, ZELLER M, FRIEDLER S A, SCHRIER J, NORQUIST A J. Machine-learning-assisted materials discovery using failed experiments[J]. Nature, 2016, 533: 73-76.
- [15] CHEN W M, LING J F, BAI K W, ZHENG K H, YIN F X, ZHANG L J, DU Y. High-throughput studies and machine learning for design of β titanium alloys with optimum properties[J]. Transactions of Nonferrous Metals Society of China, 2024, 34(10): 3194-3207.
- [16] ZHANG X H, RAN X, WANG Z, XU W, ZHU X Y, DU Z H, ZHANG J Z, LI R G, LI Y G, LU X. Designing laser powder bed fusion low-alloyed titanium with superior strength-ductility trade-off via machine learning[J]. Journal of Materials Science & Technology, 2025, 237: 323-330.
- [17] YAO Z F, JIA X, YU J X, YANG M J, HUANG C, YANG Z J, WANG C P, YANG T, WANG S, SHI R P, WEI J, LIU X J. Rapid accomplishment of strength/ductility synergy for additively manufactured Ti-6Al-4V facilitated by machine learning[J]. Materials & Design, 2023, 225: 111559.
- [18] 王毅,李高楠,刘哲,高兴誉,王洪强,宋海峰,杨明理,宿彦京, IBRAIMOV M, 李金山. 材料基因工程与智能科学: AI+ 时代无尽前沿[J]. 科技导报, 2025, 43(12): 93-109.
WANG Y, LI G N, LIU Z, GAO X Y, WANG H Q, SONG H F,

- YANG M L, SU Y J, IBRAIMOV M, LI J S. Material genome engineering and intelligent science: The endless frontier in the AI+ era[J]. *Science & Technology Review*, 2025, 43(12): 93-109.
- [19] 武雅洁, 李佩璇, 卢佳琦, 刘硕, 樊晓倩, 王毅, 李金山. AI+ 时代材料基因工程与智能科学的研究进展与挑战[J]. *铸造技术*, 2026, 47(1): 1-15.
- WU Y J, LI P X, LU J Q, LIU S, FAN X Q, WANG Y, LI J S. Research progress and challenges of material genome engineering and intelligent science in the AI+ era[J]. *Foundry Technology*, 2026, 47(1): 1-15.
- [20] LI Y J, WU C T, WANG Y H, LI N, LIU T F, LU J. Accelerating the battery revolution: AI-driven multiscale innovation from material discovery to smart manufacturing[J]. *Advanced Functional Materials*, 2025, 36(11): e14830.
- [21] White House Office of Science and Technology Policy. Materials genome initiative for global competitiveness[EB/OL]. (2011-06-24). https://obamawhitehouse.archives.gov/sites/default/files/microsites/ostp/materials_genome_initiative-final.pdf.
- [22] White House Office of Science and Technology Policy. Winning the race: America's AI action plan[EB/OL]. (2025-07). <https://www.whitehouse.gov/wp-content/uploads/2025/07/Americas-AI-Action-Plan.pdf>.
- [23] U.S. Department of Energy. Genesis mission: Transform American science and innovation through the AI computing revolution [EB/OL]. (2025-11-24). [2026-09-04]. <https://www.energy.gov/articles/energy-department-launches-genesis-mission-transform-american-science-and-innovation>.
- [24] European Technology Platform, Energy Materials Industrial Initiative, AMI 2030. Materials 2030 roadmap [EB/OL]. (2022-12). [2026-09-04]. <https://www.ami2030.eu/roadmap/>.
- [25] Department for Science, Innovation and Technology (UK). AI for science strategy[EB/OL]. (2025-11-20). [2026-09-04]. <https://www.gov.uk/government/publications/ai-for-science-strategy>.
- [26] 谢建新.《新材料大数据中心总体建设方案》专家解读系列文章之一：构建材料数据资源体系加快推进材料科技和产业数字化和智能化升级促进高质量发展[EB/OL]. (2024-10-30). [2026-09-04]. https://www.miit.gov.cn/jgsj/ycls/gzdt/art/2024/art_1ab343166c144cd4-a0c03ca12f548ec4.html.
- [27] 王冠杰, 李开旗, 彭力宇, 张壹铭, 周健, 孙志梅. 高通量自动流程集成计算与数据管理智能平台及其在合金设计中的应用[J]. *金属学报*, 2022, 58(1): 75-88.
- WANG G J, LI K Q, PENG L Y, ZHANG Y M, ZHOU J, SUN Z M. High-throughput automatic integrated material calculations and data management intelligent platform and the application in novel alloys[J]. *Acta Metallurgica Sinica*, 2022, 58(1): 75-88.
- [28] ZHANG J L, CHEN X Y, YE X, YANG Y L, AI B. Large language model in materials science: Roles, challenges, and strategic outlook [J/OL]. *Advanced Intelligent Discovery*, 2025. <https://doi.org/10.1002/aidi.202500085>.
- [29] SUN Y Z, MI G B, LI P J, HE L J. Prediction of oxidation resistance of Ti-V-Cr burn resistant titanium alloy based on machine learning[J]. *npj Materials Degradation*, 2025, 9: 3.
- [30] MURGAS B, STICKEL J, BREWER L, GHOSH S. Modeling complex polycrystalline alloys using a generative adversarial network enabled computational platform[J]. *Nature Communications*, 2024, 15: 9441.
- [31] BOIKO D A, MACKNIGHT R, KLINE B, GOMES G. Autonomous chemical research with large language models[J]. *Nature*, 2023, 624: 570-578.
- [32] PYZER-KNAPP E O, MANICA M, STAAR P, MORIN L, RUCH P, LAINO T, SMITH J R, CURIONI A. Foundation models for materials discovery - current state and future directions[J]. *npj Computational Materials*, 2025, 11: 61.
- [33] PEI Z R, YIN J Q, NEUGEBAUER J, JAIN A. Towards the holistic design of alloys with large language models[J]. *Nature Reviews Materials*, 2024, 9: 840-841.
- [34] HAO C H, WANG Z Y, MAO X Y, HE S P, LI B, LIU H Q, PENG F Y, LI W Y. A novel and scalable multimodal large language model architecture Tool-MMGPT for future tool wear prediction in titanium alloy high-speed milling processes[J]. *Computers in Industry*, 2025, 169: 104302.
- [35] LI Z Z, YOON J Y, ZHANG R, RAJABIPOUR F, SRUBAR III W V, DABO I, RADLIŃSKA A. Machine learning in concrete science: applications, challenges, and best practices[J]. *npj Computational Materials*, 2022, 8: 127.
- [36] LIU Y H, SONG Z, GUO Y, ZHU G M, FAN Y H, WANG H M, YAN W T, ZENG X Q, WANG L Y. Simultaneously enhancing strength and ductility of LPBF Ti alloy via trace Y_2O_3 nanoparticle addition[J]. *Journal of Materials Science & Technology*, 2024, 191: 146-156.
- [37] ZHANG D C, WANG L Y, ZHANG H, MALDAR A, ZHU G M, CHEN W, PARK J S, WANG J, ZENG X Q. Effect of heat treatment on the tensile behavior of selective laser melted Ti-6Al-4V by in situ X-ray characterization[J]. *Acta Materialia*, 2020, 189: 93-104.
- [38] XU Y L, ZHANG D Y, GUO Y W, HU S T, WU X P, JIANG Y J. Microstructural tailoring of as-selective laser melted Ti6Al4V alloy for high mechanical properties [J]. *Journal of Alloys and Compounds*, 2020, 816: 152536.
- [39] ZHANG L G, TANG J L, WANG Z Y, ZHOU J Y, WU D, LIU L B, MASSET P J. Pseudo-spinodal mechanism approach to designing a near- β high-strength titanium alloy through high-throughput technique[J]. *Rare Metals*, 2021, 40: 2099-2108.
- [40] XIONG S Q, LI X, WU X W, YU J, GORBATOV O I, DI MARCO I, KENT P R C, SUN W W. A combined machine learning and density functional theory study of binary Ti-Nb and Ti-Zr alloys: Stability and Young's modulus [J]. *Computational Materials Science*, 2020, 184: 109830.
- [41] XIANG C M, LI P X, JIA D, ZOU C X, WANG W Y, LI J. Unveiling the mechanisms of solid-solution strengthening in Ti alloys with dual-phase structures: An in-depth first-principles investigation[J]. *Journal of Materials Science*, 2025, 60: 3096-3112.
- [42] MORGAN D, JACOBS R. Opportunities and challenges for machine learning in materials science[J]. *Annual Review of Materials Research*, 2020, 50: 71-103.
- [43] JIANG X, XUE D Z, BAI Y, WANG W Y, LIU J J, YANG M L, SU Y J. AI4Materials: Transforming the landscape of materials science and engineering[J]. *Review of Materials Research*, 2025, 1

- (1): 100010.
- [44] ZHANG Y, REN K, WANG W Y, GAO X Y, WANG J, WANG Y G, SONG H F, LIANG X B, LI J S. Smart design $A_2Zr_2O_7$ -type high-entropy oxides through lattice-engineering toughening strategy[J]. npj Computational Materials, 2024, 10: 277.
- [45] LEE J A, PARK J, SAGONG M J, AHN S Y, CHO J W, LEE S, KIM H S. Active learning framework to optimize process parameters for additive-manufactured Ti-6Al-4V with high strength and ductility[J]. Nature Communications, 2025, 16: 931.
- [46] GUPTA T, ZAKI M, KRISHNAN N M A, MAUSAM. MatSciBERT: A materials domain language model for text mining and information extraction [J]. npj Computational Materials, 2022, 8: 102.
- [47] NI B, GLASER B, TAHERI-MOUSAVID S M. End-to-end prediction and design of additively manufacturable alloys using a generative alloy GPT model[J]. npj Computational Materials, 2025, 11: 294.
- [48] WANG P, JIANG Y, LIAO W J, WANG R, LAI M J, KOU H C, LIANG X B, LI J S, LOOKMAN T, YUAN R H. Generalizable descriptors for automatic titanium alloys design by learning from texts via large language model [J]. Acta Materialia, 2025, 296: 121275.
- [49] GAO L, SONG S Q, LIN J P, XU Y Y, WANG L Q, DU L. AI-assisted design of advanced polymeric materials: Challenges and solutions[J]. Advanced Materials, 2025, 38(7): e16857.
- [50] ZOU C X, LI J S, WANG W Y, ZHANG Y, LIN D Y, YUAN R H, WANG X D, TANG B, WANG J, GAO X Y, KOU H C, HUI X D, ZENG X Q, QIAN M, SONG H F, LIU Z K, XU D S. Integrating data mining and machine learning to discover high-strength ductile titanium alloys[J]. Acta Materialia, 2021, 202: 211-221.
- [51] YE H J, WANG W Y, LIU S, FAN X Q, WU Y L, LIU X H, LI J S. The validation and verification of high-throughput equivalent ternary CALPHAD algorithm for thermodynamic properties of multicomponent Ti alloys[J/OL]. Tungsten, 2026. <https://doi.org/10.1007/s42864-026-00389-6>.
- [52] ZHOU C L, YUAN R H, SU B L, FAN J K, TANG B, ZHANG P X, LI J S. Creep rupture life prediction of high-temperature titanium alloy using cross-material transfer learning[J]. Journal of Materials Science & Technology, 2024, 178: 39-47.
- [53] PAN J Y, SHI R H, ZHANG Z H, ZHANG H T, ZHAO Y H, LI W D, FU H D, XIE J X. Composition-deformation mechanism-property machine learning model for strength-ductility improvement of β -type titanium alloys[J]. International Journal of Plasticity, 2025, 194: 104461.
- [54] TAN Y X, DONG R F, DUAN Z Q, LI H Q, HOU H, ZHAO Y H. Machine learning coupled with an improved exhaustive method-assisted design of a low cost Ti-Al-Cr-Fe-Si series titanium alloy[J]. Materials & Design, 2025, 257: 114526.
- [55] GONG H C, FAN Q B, XIE W Q, ZHANG H M, YANG L, XU S, CHENG X W. Mining the relationship between the dynamic compression performance and basic mechanical properties of Ti20C based on machine learning methods[J]. Materials & Design, 2023, 226: 111633.
- [56] LI S, LUO H, HAO P F, XU S, YAO J H, JIN F S, FAN Q B, YANG L. Innovative data-driven design of titanium bimetal with superior strength-ductility synergy[J]. Journal of Alloys and Compounds, 2025, 1039: 183004.
- [57] HE S Y, XIAO F, LI L J, LIU Y, ZENG Y, GONG M Y, ZHOU Y, HAN J, LIU J N, JIN X J. Design biomedical β -Ti alloys with exceptional strength-ductility balance via domain knowledge-based machine learning[J]. Acta Materialia, 2025, 301: 121550.
- [58] YANG F, LI Z, WANG Q, JIANG B B, YAN B J, ZHANG P C, XU W, DONG C, LIAW P K. Cluster-formula-embedded machine learning for design of multicomponent β -Ti alloys with low Young's modulus[J]. npj Computational Materials, 2020, 6: 101.
- [59] LIU H L, GOBERT C, FERGUSON K, ABRANOVIC B, CHEN H R, BEUTH J L, ROLLETT A D, KARA L B. Inference of highly time-resolved melt pool visual characteristics and spatially-dependent lack-of-fusion defects in laser powder bed fusion using acoustic and thermal emission data[J]. Additive Manufacturing, 2024, 83: 104057.
- [60] ZHI Z L, JIANG H Q, YANG D Y, GAO J M, WANG Q S, WANG X Q, WANG J R, WU Y X. An end-to-end welding defect detection approach based on titanium alloy time-of-flight diffraction images[J]. Journal of Intelligent Manufacturing, 2023, 34: 1895-1909.
- [61] ZHANG S Y, WANG Y W, WANG X Z, LI G N, REN Y, GAO X Y, SUN F, TANG B, SONG H F, LI J S. Large language models enabled intelligent microstructure optimization and defects classification of welded titanium alloys[J]. Journal of Materials Informatics, 2024, 4: 34.
- [62] YU S, RAN N, LIU J. Large-language models: The game-changers for materials science research[J]. Artificial Intelligence Chemistry, 2024, 2(2): 100076.
- [63] SONG T, LUO M, ZHANG X L, CHEN L J, HUANG Y, CAO J Q, ZHU Q, LIU D B, ZHANG B C, ZOU G, ZHANG G Q, ZHANG F, SHANG W W, FU Y, JIANG J, LUO Y. A multiagent-driven robotic AI chemist enabling autonomous chemical research on demand[J]. Journal of the American Chemical Society, 2025, 147 (15): 12534-12545.
- [64] GHAFAROLLAHI A, BUEHLER M J. AtomAgents: Alloy design and discovery through physics-aware multi-modal multi-agent artificial intelligence [EB/OL]. arXiv, 2024(2024-07-13). [2026-09-04]. <http://arXiv.org/abs/2407.10022>.
- [65] XI Z H, CHEN W X, GUO X, HE W, DING Y W, HONG B Y, ZHANG M, WANG J Z, JIN S J, ZHOU E Y, ZHENG R, FAN X R, WANG X, XIONG L M, ZHOU Y H, WANG W R, JIANG C H, ZOU Y C, LIU X Y, YIN Z Y, DOU S H, WENG R X, QIN W J, ZHENG Y Y, QIU X P, HUANG X J, ZHANG Q, GUI T. The rise and potential of large language model based agents: A survey [J]. Science China Information Sciences, 2025, 68: 121101.
- [66] 胡毅, 王文锋. 攀钢以人工智能驱动科学研究破解行业难题 [N/OL]. 世界金属导报, (2024-10-29). [2026-9-4]. <http://www.worldmetals.com.cn/viscms/qiyedongtai0275/20241029/265918.html>.

(责任编辑:杨浩雪)