

doi:10.3969/j.issn.1001-3539.2023.09.027

机器学习在复合材料领域中的应用进展

王雅哲¹, 马其华^{1,2}

(1. 上海工程技术大学机械与汽车工程学院, 上海 201620; 2. 高性能纤维及制品教育部重点实验室(B类)东华大学, 上海 201620)

摘要: 复合材料因其密度低、比模量高、比强度高优势成为汽车轻量化重要材料。但因复合材料所涉及材料参数相对庞杂, 成本高、周期长的传统复合材料研究方法已无法适应目前复合材料的发展趋势。近年来, 基于数据挖掘的机器学习具有高效、高精等优势, 为解决上述复合材料领域现存困境提供了新思路。通过阐述机器学习技术的基本原理、应用流程以及典型算法, 总结其在复合材料领域的应用可行性。分析了机器学习在复合材料的微观结构表征、力学性能预测、复合材料优化设计、加工制造模拟速度四个方面的研究进展。分析表明, 机器学习可用于复合材料研究领域, 且具有较高的预测精度和可靠性。最后分析了机器学习在该领域的问题与挑战, 为其未来研究方向和发展提出展望。

关键词: 机器学习; 复合材料; 微观结构表征; 力学性能预测; 加工制造

中图分类号: TQ327 **文献标识码:** A **文章编号:** 1001-3539(2023)09-0167-08

Progress in Application of Machine Learning In Field of Composite Materials

Wang Yazhe¹, Ma Qihua^{1,2}

(1. School of Mechanical and Automotive Engineering, Shanghai University of Engineering Science, Shanghai 201620, China;

2. Key Laboratory of High Performance Fibers & Products, Ministry of Education, Donghua University, Shanghai 201620, China)

Abstract : Composite material has become an important material for automotive lightweight due to its advantages of low density, high specific modulus and high specific strength. However, with the increase in the amount of material parameter data involved in composite materials and the aggravation of data complexity, the traditional research methods of composite materials with high cost and long cycle can no longer adapt to the current development trend of composite materials. In recent years, machine learning based on data mining has the advantages of high efficiency and high precision, which provides a new way to solve the existing difficulties in the field of composite materials. The basic principle, application flow and typical algorithm of machine learning technology were described, and the feasibility of its application in the field of composite materials was summarized. The research progress of machine learning in microstructure characterization, mechanical property prediction, optimal design of composite materials and simulation speed of machining and manufacturing were analyzed. The analysis show that machine learning can be used in the field of composite materials with high prediction accuracy and reliability. At the same time, the problems and challenges of machine learning in this field were analyzed, and the prospect of its future research direction and development were put forward.

Keywords : machine learning ; composite material ; microstructure characterization ; mechanical properties prediction ; processing and manufacturing

机器学习(ML)^[1]作为人工智能的分支之一, 它可以通过学习输入和输出之间的模式来做出预测和推断, 无须事先了解系统内部的运作原理。这使得ML可以处理复杂、高度非线性的问题, 正因为其具有这种“黑箱”性质, 在数据挖掘、图

像识别、机器推理以及材料设计^[2-3]其他领域^[4-6]等复杂问题上都得到了很好的验证。

随着技术的不断进步和数据的不断积累, ML等数据驱动算法在汽车、航空航天、轨道交通等重要工程领域得到广

基金项目: 2023年高性能纤维及制品教育部重点实验室(B类)开放课题支持

通信作者: 马其华, 副教授, 博士研究生, 主要从事复合材料汽车轻量化研究

收稿日期: 2023-06-29

引用格式: 王雅哲, 马其华. 机器学习在复合材料领域中的应用进展[J]. 工程塑料应用, 2023, 51(9): 167-174.

Wang Yazhe, Ma Qihua. Progress in the application of machine learning in the field of composite materials[J]. Engineering Plastics Application, 2023, 51(9): 167-174.

泛应用^[7-8],为这些领域带来了高效、安全、智能化的改进。同时,这些算法为科学研究提供了新的方法,取代了传统繁琐复杂的人工工作,其优势在于具有强大的自动学习能力、自适应性和处理高度非线性问题的能力,且能够提供高度准确的计算结果。特别是在复合材料的设计制造过程中,传统的复合材料研究方法,主要以试验法、解析法和数值模拟为主,然而这些方法存在试验成本高、耗时费力且对复合材料微观结构的描述具有一定的难度^[9],人工智能、ML等新技术的出现为研究复合材料提供了新的方法,并且计算更加快速、精确,极大地促进了复合材料领域的发展。相比于金属材料而言,复合材料在力学性能上的材料组分的多样性和高度各向异性等特征影响较大,导致其拥有庞大的数据量。ML技术能够处理复合材料领域丰富的数据,因此,将ML技术应用于复合材料领域进行研究,通过构建代理模型,有效地建立了复合材料加工-结构-性能-设计之间的关系。

笔者基于对ML技术介绍的基础上,讨论了常用的算法及算法的改进,重点综述了ML技术在ML辅助复合材料结构表征、性能预测、指导优化设计、加快加工模拟速度四方面的应用现状,对目前研究的重难点问题进行了客观评价与分析,并展望了其未来发展的趋势。

1 ML的简介

ML作为数据驱动科学中最重要的子领域,利用多领域学科知识研究计算机如何对人类的学习行为进行模拟和实现,其基本原理是对大量的数据和过去的经验进行自主学习,从中挖掘数据之间的复杂关系和规律,并将这些关系和规律应用于新的数据中,通过不断学习和自我改进,逐渐适

应新环境和任务。ML技术流程如图1所示,首先要进行特征数据收集和整理,数据集是ML的基础,通常源于数值模拟、大量的实验以及公开文献的发表等不同途径中获取,其数量和质量是预测模型的性能的关键。为了对ML模型进行评估和验证,一般按一定比例将数据集划分为训练集和测试集。其次,根据具体问题分析任务类型和已有数据结构,构建合适的ML模型;接着,将选定的ML算法对训练集的输入参数与输出性能进行训练,再通过均方根误差、均方误差、决定系数 R^2 等指标评估模型,若模型性能评估结果满足条件,则执行下一步;反之,根据结果不断调优和改进(如调整超参数)或者对数据集进一步处理,重新训练模型结构,直到满足评估条件。最后,得到训练好的模型后,需要在新样本(由实验或有限元测试集获得)上进行测试,并分析结果。

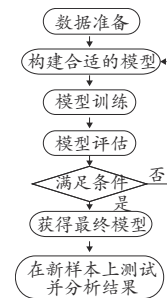


图1 ML的流程

ML系统按学习任务通常被分为监督、无监督学习和强化学习三大类,表1列出了ML的典型算法和应用领域。在监督学习问题中,一组训练数据集中都包含明确的标记,即每个样本的输入特征有相对应的输出标签,当构建模型时,

表1 典型的ML算法及其应用领域

学习任务	类型	算法	优点	缺点	应用
监督学习	分类与回归	决策树(DT) ^[10]	易于理解和解释,可以处理离散和连续特征,对异常值不敏感	容易过拟合,泛化能力较弱	性能预测
		支持向量机(SVM) ^[11]	能够处理高维数据,可以通过使用不同的核函数来适应不同的数据结构	对于大规模数据集的计算复杂度较高	数据分类,文本归类,模拟预测
		随机森林(RF) ^[12]	具有较高的准确性,抗过拟合能力强,可以处理高维数据	模型解释性较差,训练耗时较长	异常检测
		人工神经网络(ANN) ^[13]	较强的非线性映射	训练需要大量的标记数据和计算资源	语音识别、数据压缩、优化设计
		深度学习(DL) ^[14]	对图像处理具有优势	网络结构复杂性高、容易过拟合	处理图像、语音和文本
无监督学习	聚类	K均值聚类 ^[15]	实现简单,计算效率高,适用于大规模数据集	处理噪声和处理不同尺寸、形状和密度的簇效果较差	分类、图像压缩
		层次聚类 ^[16]	可以在多个尺度上生成不同细节层次的聚类结果	复杂度较高,对噪声和异常值比较敏感	生物学分类和图像分割
		DBSCAN聚类 ^[17]	可以发现任意形状的聚类,并且不需要预先指定聚类个数	对于簇的密度变化较大的数据,效果可能较差	异常检测、图像分割
	降维	主成分分析(PCA) ^[18]	降低数据的维度,减少特征数量,同时保留数据集中的关键信息。	处理高维稀疏数据时,可能会出现信息损失	数据预处理,去除噪声和冗余信息
		线性判别分析(LDA) ^[19]	降维的同时能够保持类别信息	在训练样本较少的情况下,容易过拟合	图像识别、人脸识别和生物特征识别
强化学习	分类与回归	Q-learning ^[20]	适应性强、擅长探索与利用平衡	训练成本高、可解释性差	游戏、机器人控制、金融交易

会将输入参数生成的预测结果与实际输出结果作比较,并不断更新调整模型的准确率。监督学习任务中最常用的两种类型是分类和回归。这两种类型的问题往往可以通过一些算法得到有效处理,尤其是人工神经网络,它是一种受到生物神经系统启发的ML算法,由多个神经元组成,通过调整节点之间的连接权重和偏置来训练模型并进行分类或回归预测。其结构包括输入层(接收外部输入数据)、隐藏层(对输入数据进行特征提取和维度变换)和输出层(输出最终的结果)。此外,人工神经网络的发展引导了深度学习的兴起,深度学习以多个隐藏层的神经网络结构为特点,能够处理更复杂的任务和大规模数据。在无监督学习中,训练的样本数据为没有标签的数据,即每个样本只有输入特征,这就需要其自主去分析数据集并发现其内在隐藏关系,其中,无监督学习任务最常用的是聚类和降维,其常见的算法包括K均值聚类、主成分分析法算法等。强化学习是指一个智能体和环境之间的交互学习。基于上述不同的ML类型,在实际应用中,可以根据数据集中每个样本是否有标记,选用正确的ML类型;对于相同数据集,基于具体的目标问题,合理地选择适当的ML算法对目标预测结果至关重要。

2 ML在复合材料领域的应用进程分析

ML作为一种新技术方法,其优势在于可以代替人类进行较大的计算推理与评估验证,代替传统、繁琐复杂的人类工作,并且结果准确率也可得到有效保障。在复合材料领域的研究中,回归与分类多用于复合材料的性能预测、缺陷检测、疲劳寿命预测等方面。笔者基于监督学习、无监督学习和强化学习的ML方法在复合材料结构表征、对其力学性能预测、指导复合材料的优化设计和加快复合材料加工模拟速度四个方面的应用详细讨论。

2.1 ML辅助复合材料微观结构表征的研究

复合材料的微观结构直接影响其宏观性能,因此精确的测量是其微观结构表征的关键。多数学者利用金相组织分析、扫描电子显微镜(SEM)技术以及X射线计算机断层扫描(CT)等观测方法,对复合材料微观结构、裂纹预测和损伤演化进行分析,然而,这些方法主要依赖于测量精细的试验设备和研究人员丰富的经验,存在一定的局限性。近年来,随着ML技术的飞速发展,图像识别技术能够高效准确地从复合材料的微观结构中获取有价值的信息。深度学习作为ML的子领域,基于人工神经网络的结构框架,具有多层神经元网络,能够通过很强的特征学习和表达能力从而解决复杂的非线性问题,因此,已逐渐地取代ML成为复合材料微观结构表征领域的主流方法。

其中,卷积神经网络(CNN)作为深度学习的一种特殊情况,由一个或多个网络层执行卷积操作,因具有图像识别、目标检测和图像分割等功能,大部分学者将其应用于复合材料的结构表征和分析中,为实现对复合材料微观结构、裂纹预测和损伤演化提供了极大地便利,其结构原理如图2所示。

利用CNN图像分割的优势,通过图像和深度学习相结

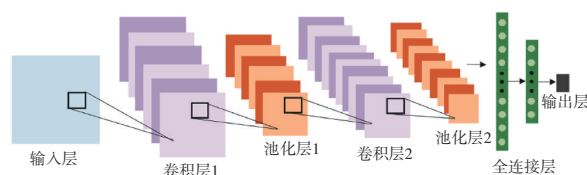


图2 卷积神经网络原理图

合,能够辅助材料内部结构的表征。在研究复合材料微观组分信息方面,Sinchuk等^[21]对低对比度和低分辨率下的碳纤维/环氧编制复合材料的X射线CT图像进行预处理,通过CNN算法实现对纤维和基体组分信息的分割,解决了传统分割方法无法对低分辨率图像中组分信息的缺陷。Badran等^[22]针对单向纤维增强陶瓷基复合材料,采用卷积神经网络,通过对训练数据进行学习,为实现纤维和基质等组分的准确分割提供了一种自动化的解决方案,大大减少了传统人工处理的工作量。Evsevlev等^[23]利用同步X射线计算机断层扫描(SXCT)得到任意体积的三维微观结构定量信息,使用了一种改进的卷积神经网络U-net结构,对一个五相金属基复合材料进行了三维微观结构表征。结果表明,其分割精度足以估计一个五相复合材料中每个单独相的体积特性,为进一步提取如体积分数、纤维取向和分布以及相互关联性的重要微观结构特征提供了许多可能性。Lin等^[24]基于CNN模型实现了对纳米级别复合材料的特征提取,如石墨烯氧化物和二氧化硅的分布、形状和尺寸,突出了CNN模型较传统表征方法更具优势。

在研究复合材料微观缺陷方面,基于深度学习的智能图像分割有助于实现了复合材料裂纹检测、损伤演化的定量分析以及失效机理的研究。Khan等^[25]利用CNN模型自动从光谱图中自动提取特征,对复合材料层合板分层情况进行识别,测试的准确率达94.1%,其方法较好检测了复合材料的损伤形态;Lorenzoni^[26]和冯宇琦^[27]利用X射线CT技术与深度学习方法相结合,实现了复合材料聚合物纤维和孔隙的精确分割以及基体裂纹、纤维拔出、界面脱黏这3种损伤模式的分割、提取与三维可视化;杜永龙等^[28]通过对陶瓷基复合材料开展X射线CT原位拉伸试验获得了载荷作用下材料内部三维重构图像,基于深度学习U-Net架构高效、准确地识别出陶瓷基复合材料空间裂纹分布,得出孔隙对裂纹产生位置有直接的影响,打破了传统二维切片观测的局限性。

表2对于上述两种应用场景下研究者的工作,做出了以下总结:综上所述,对于不同增强相的复合材料主要通过深度学习表征材料内部的微观结构信息。一般由输入层输入复合材料的二维切片图像,基于深度学习方法进行学习与训练,能够成功分割出纤维、基体、孔隙等复合材料组分信息。随着人们对材料性能的要求不断提高,要想从根本上提升复合材料宏观结构的力学性能,应当重视解决复合材料微观定量信息的空间结构分布和排列问题。此外,由于CNN分析还存在数据准备时间、计算和模型调整成本等局限性,还待进一步解决,为更好理解和优化材料性能提供重要的基础。

表2 应用ML方法辅助复合材料微观结构表征

应用场景	作者	复合材料	算法	数据集来源	输入	输出
复合材料微观组分信息	Sinchuk	碳/环氧机织复合材料	U-net	CT	二维切片图像	纤维、基体、孔隙的体积分数
	Badran	纤维增强陶瓷复合材料	CNN			SiC纤维、SiC基体、孔隙和涂层
	Evsevlev	五相金属基复合材料	U-net	SXCT		五相的体积分数
	Lin	纳米水泥基复合材料	CNN	SEM		纳米颗粒的分布、大小及形状
复合材料微观缺陷	Khan	复合材料层合板	CNN	CT	基于振动的光谱图	层合板的分层情况
	Lorenzoni、冯宇琦	水泥基复合材料	CNN		二维切片图像	孔隙、纤维、石英砂颗粒组分信息及裂缝
	杜永龙	陶瓷基复合材料	U-Net			陶瓷基复合材料空间裂纹分布

2.2 ML技术预测复合材料力学性能的研究

复合材料结构件因高强度、高弹性模量等性能优势逐渐取代传统金属材料。然而,由于复合材料内部结构复杂,为其力学性能的准确预测与分析带来了挑战。目前,通常采用拉伸、压缩、剪切等试验方法直接对样件进行力学性能测试,或从多尺度计算均匀化过程中获得了复合材料的宏观特性,并建立有限元模型实现其性能预测,研究其微观结构参数(如纤维尺寸和体积分数)和材料的响应之间的关系,以及研究缺陷、界面和非线性在材料行为中的作用,但这种方法还

存在预测精度不够的缺陷。目前,充分利用ML技术智能、准确、高效的优点,能有效寻找复合材料微观结构参数与力学性能之间的相关性。

复合材料力学性能的准确预测是应用于结构设计制造的必要前提。针对ML在力学行为研究中的应用,研究人员开始使用不同的回归方法预测不同复合材料的力学行为,建立起复合材料微结构特征与性能之间隐藏关系。表3列出了学者们应用ML方法预测复合材料基本力学性能的研究。在复合材料的力学建模研究中,根据ML代理模型的训练数

表3 应用ML方法预测复合材料基本力学性能

作者	复合材料	算法	数据集来源	输入	输出	准确性
闫海 ^[29]	短纤维增强聚氨酯复合材料	BP神经网络、响应面、SVM	有限元数据	纤维长宽比、排布方向、纤维之间的相对距离	拉伸及剪切弹性模量	在考虑纤维取向角度下,预测精度为80%
		CNN		rve图像		CNN相较于其他训练结果预测精度在98%以上
Ding ^[30]	复合材料薄板	深度神经网络(DNN)	有限元数据	纤维体积分数和纤维半径	拉伸强度及其弹性模量	DNN模型测试集的性能指标 R^2 均在0.95以上,非常接近于1
崔前红 ^[31]	单向板	K最近邻、DT、梯度提升回归树(GBRT)	有限元数据	纤维横纵向模量、体分比、基体拉伸弹性模量、泊松比等9个参数	拉伸、压缩、剪切弹性模量、泊松比	GBRT模型测试集上对应的预测精度达97%以上
Shirolikar ^[32]	碳纤维增强复合材料	SVR,多层感知机(MLP)、GBRT,RNN	试验数据	稳定化和碳化的应变、停留时间、温度等31个参数	拉伸强度及其弹性模量	循环神经网络(RNN)模型优于所有其他模型,拉伸强度及其弹性模量的 R^2 值分别为0.85和0.67
Kabbani ^[33]	玻璃纤维聚丙烯复合材料	ANN	试验数据	纤维取向角度、冷却速率和极限强度	极限应变	弹性模量预测和极限应变的最小精度分别为97%和90%
Mentges ^[34]	短纤维增强聚丙烯复合材料	ANN	有限元数据	纤维体积分数、纤维直径、长宽比以及方向张量等12个参数	复合材料的刚度	ANN模型测试集的最小均方根误差(RMSE)为0.0046
孔青荣 ^[35]	SiC增强AZ61镁合金复合材料	BP神经网络	试验数据	SiC颗粒体积分、加热温度、搅拌时间	拉伸强度、伸长率	BP神经网络的均方误差(MSE)不超过0.0001
Zazoum ^[36]	纳米增强聚乙烯复合材料	DNN	试验数据	纳米黏土和增容剂的质量分数、螺杆速度和进料速率	拉伸强度及其弹性模量	实验结果与预测数据对拉伸模量和抗拉强度的相对误差不超过3.60%和1%。
Wang ^[37]	多层编织碳纤维环氧树脂增强复合材料管状结构	ANN	试验数据	纤维层数、管内径、管的质量、壁厚、纤维质量比等9个参数	峰值力、峰值力对应的位移、平均破碎力、有效压缩行程	与实验测量结果相比,人工神经网络模型预测结果的平均绝对误差(MAE)不超过10%

据获取方式可以进行分类,即试验数据和有限元模拟。这些数据包括复合材料的微观结构参数、尺寸、组成成分信息以及制备时的加工条件,它们作为ML算法的输入,用于预测不同复合材料的力学性能,包括强度性能(比如压缩强度、拉伸强度、弯曲强度等)和刚度性能(比如拉伸弹性模量、剪切模量)等性能指标。

在复合材料制备过程中,材料的成分和工艺参数对其力学性能等特性有显著的影响。对于纤维增强复合材料,常用监督学习进行回归与分类问题的分析,将纤维的尺寸、长宽比、位置、角度、半径等几何参数^[29-31]或复合材料加工制备过程中的条件参数^[32]、或两者相结合^[33-34]作为输入,弹性模量、拉伸强度、伸长率等性能作为输出建立ML预测模型,辅助复合材料性能优化,可以缩短实验和有限元模拟时间,提高效率。研究表明,对于较简单的单向纤维增强复合材料,在给定的纤维数量下,纤维的方向不确定性对复合材料的力学性能具有较高的敏感度。传统的ML方法在处理这个问题上存在一定的局限性。然而,随着ML技术的发展,特别是CNN模型,复合材料的性能预测和优化问题可以得到更好的解决。RNN模型因其处理序列数据能力强,更好地代表了实际的制造过程,且不易过拟合,未来还需开发一种可以考虑整个碳纤维制造过程的ML模型,节省时间成本的同时加速下一代碳纤维的开发。对于金属相^[35]等其他相^[36-37]增强复合材料,根据增强相的体积分数、胶黏剂的重量分数等几何参数与加工工艺相结合作为ML算法的输入,预测金属基、陶瓷基复合材料的力学性能。

复合材料的服役性能受工况、环境等多种因素的影响,且这些因素与材料性能之间存在高度非线性的关系,因此,建立工况条件与材料其它性能(如冲击性能、疲劳性能、摩擦性能等)的预测模型具有重要意义。如廖兴升等^[38]利用人工神经网络(ANN)对玻璃纤维增强树脂基复合材料疲劳过程的归一化的剩余频率变化量与材料剩余疲劳寿命之间的关系,建立了以归一化频率为输入参数,材料剩余刚度为输出参数,用来推测其剩余疲劳寿命。ML技术在复合材料性能预测方面具有很大的潜力,未来有待将ML更广泛的应用于复合材料的其他性能预测。文献[39-41]运用神经网络模型结合试验数据集,分别对冲击载荷下的复合材料板、圆管、层合板进行残余抗拉强度、承载能力以及压缩强度性能预测,模型均能准确的评估。Kumar等^[42]使用了三种ML方法[ANN,RF,GBM(梯度提升机)],以施加载荷和滑动位移摩擦变量作为输入,对掺入石墨烯的编织玻璃纤维增强环氧树脂(GFRE)复合材料的摩擦性能的比较影响,ANN,RF和GBM模型中的 R^2 值分别为0.988 3、0.988 4、0.976 2,表明RF表现性最好。Kordijazi等^[43]利用多种ML模型,以粒度、硅百分比,液滴大小等参数作为输入,预测了金属合金及其金属基复合材料的润湿性能。综上,ML技术在复合材料性能预测方面具有很大的潜力,在未来有望更广泛的应用于其他性能预测。

2.3 ML指导新型复合材料的优化与设计

ML是一种优化与设计复合材料的很有前途替代方法,它的最新快速发展显示了在计算力学领域的各种成功应用。为了实现复合材料的快速发展,可以利用ML实现结构-性能的设计,以所对应的复合材料的结构、成分等参数,预测复合材料的属性为输入,面向目标属性需求进行复合材料设计。如Qiu等^[44]在给定的数据库中,使用生成对抗网络(GAN)模型来辅助生成纤维金属层合板分层设计,GAN模型由于其能够生成新的看不见的的数据,为逆向设计问题提供了见解。GAN背后的基本思想是用两个网络组成一个耦合系统,其中生成器网络用于将随机噪声转换为期望的输出,判别器通常是一个二元分类模型,用于判断生成器提供的输出的真假性。模型以纤维材料和铺层序列为设计变量,对性能进行预测,生成满足要求的层合板结构,其GAN的体系结构如图3所示。

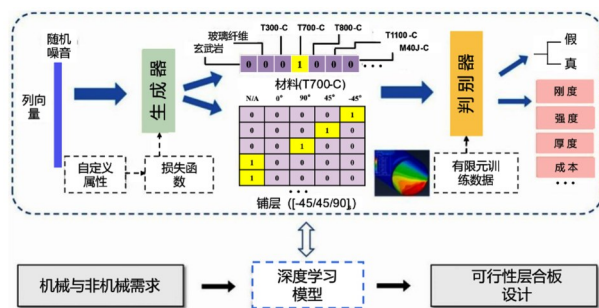


图3 GAN的体系结构^[44]

在复合材料的优化设计中,已逐渐形成了遗传算法与神经网络相结合、反复迭代,实现复合材料的优化设计的成熟模式,如Mairpady等^[45]针对纳米生物复合材料的最大化力学性能进行研究,为了最大限度地降低局部优化的风险,采用了一种ANN-GA组合技术来优化多个响应,在纳米填料和增容剂的浓度和断裂强度、屈服强度、拉伸弹性模量参数之间建立响应关系,误差最小且回归值高于95%。除此之外,人工蜂群算法、模拟退火算法、萤火虫算法和粒子群算法等新型智能计算方法与ML技术相结合也逐渐应用于复合材料的多目标优化设计^[46-48]。Dong等^[49]使用ML技术和非支配排序遗传算法(NSGA-II)来解决石墨基纳米材料增强水泥复合材料(GNRCC)的多目标设计优化问题,成功获得了帕累托解,可以方便地为GNRCC设计选择合适参数。

综上,在ML指导复合材料优化设计研发过程中,首先需要获取足够的数据用以训练预测模型,并且要根据目标问题合理选择优化设计模型,有助于获得更好的预测结果。但目前,对于复杂的复合材料设计体系,从宏观性能到微观结构参数的逆向设计仍存在诸多困难。未来可以基于ML与人工智能优化多种算法相结合,进而指导复合材料逆向设计的开发。

2.4 ML加快复合材料加工模拟速度的研究

复合材料的制造工艺往往十分复杂,常见的包含浸渍、

铺层、固结和固化四个加工流程,由于具体使用场景不同,加工顺序也存在差异。为了降低生产成本,减少加工过程中不必要的缺陷,复合材料加工过程的模拟越来越被重视,通常,研究者使用有限元软件或传统的ML模型进行计算。在使用ABAQUS、ANSYS等商用有限元软件进行数值模拟复合材料加工过程中,考虑到复合材料的工艺复杂,往往需要对所建立的三维有限元模型划分细密的网格和施加准确的边界条件,并且需要大量的计算周期才能得到近似结果,这种方法非常耗时且计算精确度浮动大;为了提高模拟速度,降阶有限元模型^[50]可以对三维有限元模型进行取代,但计算精度有所降低。因此,有学者将有限元模拟结果和理论有效地集成到传统的ML方法中来解决复合材料加工模拟速度和计算精度问题。传统的ML方法已应用于复合材料制造的不同方面,包括AFP加工^[51]中的原位缺陷检测、固化动力学表征、固化过程模拟^[52-53]、加工^[54]、无损检测^[55]等。考虑到ML往往需要大量的数据,理论指导机器学习(TGML)相较于ML体现在使用少量的数据集,除了训练区域之外,预测也更准确且速度显著提高。

TGML是一种新兴范式,由于它可以使用有限元工具生成数据,引入基于物理的特征,建立物理可解释的模型架构,使用基于物理的函数丰富损失函数,以及约束响应面,使得在ML的基础上模型预测更准确。Lavaggi等^[56]通过TGML方法在基于物理模拟产生的数据集上对预测蜂窝夹层结构的共固化过程进行训练,计算时间减少几个数量级,且通过调整输入工艺参数以获得所需的特性。Zobeiry等^[50]基于TGML的不同方法研究了应用于复合材料加工过程中的三个案例,其方法包括基于封闭形式解的物理特征变换、基于问题物理性质的激活函数选择、基于物理近似解的预训练以及基于解的渐近行为理解的基于物理的特征变换。在案例1中,小型TGML模型的准确性优于非常复杂的大型ML模型的准确性。案例2表明,减少一部分所需的数据点,可以提高TGML模型的准确性。在案例3中,将工具厚度、传热系数等相关参数作为神经网络模型的输入,并结合基于sigmoid函数推导的加热速率进行训练,来预测复合材料的放热性能,模型的性能显著改善,最大误差从4.9℃下降到3.0℃。TGML模型有效地将最大误差值降低到期望的范围,大大提高速度增益,这为大型复合材料组件实现了近乎实时的仿真速度,如图4中,为对机翼蒙皮的不同模拟方法进行热化学分析的模拟时间对比。与有限元模型相比和传统ML相比,TGML模型有以下优势:对训练区域之外的也

能准确预测性能趋势;即使在小数据集和简单的神经网络架构下也能达到很高准确性,有效减少误差,且计算速度快。

综上所述,TGML模型提高了模型的可解释性,使得“黑匣子”变为“白匣子”,进一步加速了理解其中的映射关系,这为工程师快速探索整个设计范围并优化设计提供了巨大的机会,因此,TGML有效地将领域知识和理论融入传统的ML方法,已被确定为未来几年的重点研究领域之一。目前,TGML模型只应用在证明复合材料的加工能力,该技术还可以用于其他复合材料的加工应用中。其方法的局限性在于TGML模型需要深入的数学和统计知识,以及对ML算法和模型的深入理解,这使得对其应用和实施的要求相对较高,限制了广泛应用的范围;其次,需要大量的高质量数据进行训练和验证;尽管理论指导ML提供了有关算法和模型的理论分析和保证,但某些情况下,现有的算法和模型不能很好地适应实际问题的复杂性和多样性;在某些实际场景中,理论指导ML的应用可能并不被广泛接受或被认为不够实用。一些实际问题可能比较复杂,无法通过现有的理论模型来完全解决,因此实践中更倾向于使用经验和实证方法。

3 结语

近年来,ML技术在复合材料研究领域得到了广泛的应用,为辅助复合材料微观成分信息的表征和力学性能的预测提供了有力的模型支撑,同时也促进了新型复合材料的设计和制造。笔者对ML常用算法与应用场景进行了介绍,并从微观结构表征、力学性能预测、优化与设计、加工制造四方面总结了ML技术在该领域的最新进展与重要应用成果。目前,基于ML的研究仍面临着许多困难和挑战,但有信心充分挖掘ML在复合材料领域研究的潜力。鉴于此,提出以下展望:

(1)构建更完整、更丰富的复合材料数据库平台,以克服数据稀缺对响应结果带来的影响。数据作为ML的基础,其规模和质量很大程度上决定了模型的准确性。未来应建立更多样化、更完备的复合材料体系,可以实时更新,有助于加快复合材料的研究和提高模型的泛化能力。同时,还需开发多模态数据(如图像数据、X射线衍射和任何其他结构数据)的数据方法,作为ML框架的一部分。

(2)开发新的ML算法或完善现有算法,提高复合材料的性能预测模型的普适性。针对不同复合材料的性能预测,在满足精度的前提下,利用改进ML算法建立考虑多物理场耦合的通用的ML模型,提高复合材料性能预测的效率,促进复合材料的开发设计。

(3)复合材料反向设计是目前的热点之一。基于训练好的ML模型,通过反向设计筛选出最优的微观结构信息,指导复合材料的结构设计和生成。协同优化算法如遗传算法、蚁群算法等可被用于优化结构设计促进复合材料的逆向设计。利用材料科学、ML、智能制造等多学科的专业知识和技术,推动基于ML的复合材料反向设计与制备技术的综合应用。

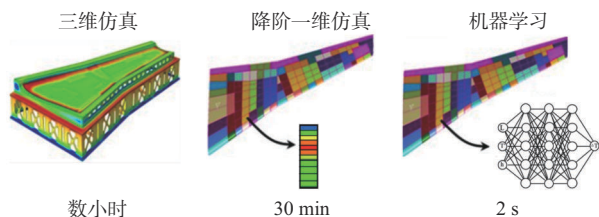


图4 机翼蒙皮不同计算方法计算时间对比^[50]

(4)提高复合材料模型的可解释性,如采用理论指导ML模型的应用,通过建立复合材料的物理或化学模型,引入理论模型的预测结果对预测模型进行解释,提高了输入与输出的响应速度,并促进复合材料的研发和应用。

参考文献

- [1] Jordan M I, et al. Science, 2015, 349(6245):255–260.
- [2] Tang S, et al. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 2019, 357. DOI:10.1016/j.cma.2019.112587.
- [3] Yang Z, et al. Science Advances, 2021, 7(15). DOI:10.1126/sciadv.abd7416.
- [4] Liu D, et al. Chemistry of Materials, 2019, 31(24):10 117–10 125.
- [5] Rajkomar A, et al. The New England Journal of Medicine 2019, 380(14):1 347–1 358.
- [6] 刘锋,等.工程塑料应用,2021,49(2):74–79.
Liu Feng, et al. Application of Engineering Plastics, 2019, 49(2): 74–79.
- [7] 刘奕洲.中国设备工程,2018,403(18):166–167.
Liu Yizhou. China Equipment Engineering, 2018, 403(18):166–167.
- [8] 樊星.化学工业,2019,37(4):12–16,25.
Fan Xing. Chemical Industry, 2019, 37(4):12–16,25.
- [9] 吴圣川,等.机械工程学报,2021,57(16):37–65.
Wu Shengchuan, et al. Chinese Journal of Mechanical Engineering, 2019, 57(16):37–65.
- [10] 朱剑峰.基于决策树的温室环境调控规则设计及其应用研究[D].浙江:浙江大学,2017.
Zhu Jianfeng. Design and application of greenhouse environmental regulation rules based on decision tree[D]. Zhejiang: Zhejiang University, 2017.
- [11] Catal C, et al. Applied of Computing, 2017:135–141.
- [12] 宋建,等.工程塑料应用,2021,49(8):54–60.
Song Jian, et al. Engineering Plastics Application, 2021, 49(8): 54–60.
- [13] 黄年昌.人工神经网络技术在橡胶减振器设计中的应用研究[D].青岛:青岛科技大学,2018.
Huang Nianchang. Application of artificial neural network technology in rubber shock absorber design[D]. Qingdao: Qingdao University of Science and Technology, 2018.
- [14] 贺钰茹.基于深度学习与MRI结构信息的动态PET滤波方法研究[D].广州:南方医科大学,2021.
He Yuru. Research on dynamic PET filtering method based on deep learning and MRI structure information[D]. Guangzhou: Southern Medical University, 2021.
- [15] Nawaf H M M S, et al. IEEE Access, 2021, 9:4 820–4 828.
- [16] Pruthviraju G, et al. Silicon, 2021 13:961–972.
- [17] 荣秋生,等.计算机应用,2004(4):45–46,61.
Rong Qiusheng, et al. Journal of Computer Applications, 2004(4): 45–46,61.
- [18] Malinowski P H, et al. Composite Structures, 2021, 266. DOI: 10.1016/j.compstruct.2021.113820.
- [19] 董虎胜.现代计算机(专业版),2016(29):36–40.
Dong Husheng. Modern Computer (Professional Edition), 2016 (29):36–40.
- [20] Yu C H, et al. Advanced Theory and Simulations, 2022, 5(11). DOI:10.1002/adts.202200459.
- [21] Sinchuk Y, et al. Materials, 2020, 13(4). DOI: 10.3390/ma13040936.
- [22] Badran A, et al. Journal of Materials Science, 2020, 55(34):1–17.
- [23] Evsevlev S, et al. Advanced Engineering Materials, 2020, 22(4). DOI:10.1002/adem.201901197.
- [24] Lin Junlin, et al. Cement and Concrete Research, 2022, 154. DOI: 10.3390/met11060883.
- [25] Khan A, et al. Sensors, 2020, 20(8). DOI:10.3390/s20082335.
- [26] Lorenzoni R, et al. Cement & Concrete Composites, 2020, 108. DOI:10.1016/j.cemconcomp.2020.103551.
- [27] 冯宇琦,等.硅酸盐学报,2021,49(8):1 765–1 775.
Feng Yuqi, et al. Journal of the Chinese Academy of Ceramics, 2015, 49(8):1 765–1 775.
- [28] 杜永龙,等.硅酸盐通报,2022,41(1):249–257.
Du Yonglong, et al. Bulletin of Silicate, 2002, 41(1):249–257.
- [29] 闫海,等.复合材料学报,2019,36(6):1 413–1 420.
Yan Hai, et al. Journal of Composite Materials, 2019, 36(6):1 413–1 420.
- [30] Ding X, et al. Composite Structures, 2022, 302. DOI: 10.1016/j.compstruct.2022.116248.
- [31] 崔前红.基于机器学习的复合材料单向板宏观性能预测研究[D].湖南:湖南大学,2020.
Cui Qianhong. Research on macroscopic performance prediction of composite one-way plate based on Machine learning[D]. Hunan: Hunan University, 2020.
- [32] Shirolkar N, et al. Carbon, 2021, 174:605–616.
- [33] Kabbani M S, et al. Journal of Thermoplastic Composite Materials, 2019, 32(9):1 268–1 281.
- [34] Mentges N, et al. Composites Part B: Engineering, 2021, 213. DOI:10.1016/j.compositesb.2021.108736.
- [35] 孔青荣,等.轻合金加工技术,2010,38(4):35–38.
Kong Qingrong, et al. Light Alloy Processing Technology, 2010, 38(4):35–38.
- [36] Zazoum B, et al. Materials, 2020, 13(19). DOI: 10.3390/ma13194266.
- [37] Wang W, et al. Materials & Design, 2021, 212. DOI: 10.1016/j.matdes.2021.110181.
- [38] 廖兴升.基于频率预测GFRP层合梁的剩余疲劳寿命[D].广州:

- 广州大学, 2021.
- Liao Xingsheng. Prediction of residual fatigue life of GFRP laminated beams based on frequency[D]. Guangzhou: Guangzhou University, 2021.
- [39] D'Addona D, et al. *Journal of Intelligent & Fuzzy Systems*, 2012, 23(5):217–223.
- [40] Laban O, et al. *Composite Structures*, 2020, 243. DOI: 10.1016/j.compstruct.2020.112247.
- [41] 盛鸣剑, 等. *上海交通大学学报*, 2019, 53(10):1 182–1 186.
- Sheng Mingjian, et al. *Journal of Shanghai Jiao Tong University*, 2019, 53(10):1 182–1 186.
- [42] Kumar S, et al. *Polymer Composites*, 2022, 43(9):6 599–6 610.
- [43] Kordijazi A, et al. *Langmuir*, 2021, 37(12):3 766–3 777.
- [44] Qiu C, et al. *Composites Science and Technology*, 2022, 230(2). DOI: 10.1016/j.compscitech.2021.109154.
- [45] Mairpady A, et al. *Polymers*, 2021, 13(18). DOI: 10.3390/polym13183100.
- [46] Erdal O, et al. *Composite Structures*, 2005, 71(1):45–52.
- [47] Vosoughi A R, et al. *Composite Structures*, 2017, 159:361–367.
- [48] Gautam G D, et al. *Composites Part B: Engineering*, 2019, 176. DOI: 10.1016/j.compositesb.2019.107340.
- [49] Dong W, et al. *Construction and Building Materials*, 2022, 33. DOI: 10.1016/j.conbuildmat.2022.127198.
- [50] Zobeiry N, et al. Applications of machine learning for process modeling of composites[C]//SAMPE Virtual Conference. 2020. DOI: 10.48550/arXiv.2103.16010.
- [51] Sacco C, et al. Machine learning based AFP inspection: A tool for characterization and integration[R]. 2019.
- [52] Zobeiry N, et al. Theory-guided machine learning for processing of advanced composites[J]. *Machine Learning* 2019.
- [53] Zobeiry N, et al. Theory-guided machine learning composites processing modelling for manufacturability assessment in preliminary design[C]//Proceedings of the NAFEMS 17th World Congress, Quebec City. 2019:17–20.
- [54] Lin J T, et al. *Composites Science and Technology*, 2003, 63(3–4): 539–548.
- [55] Farhana N I E, et al. *Composite Structures*, 2016, 144:96–107.
- [56] Lavaggi T, et al. *Polymer Composites*, 2022, 43(8):5 319–5 331.
- ~~~~~
- (上接第 166 页)
- [26] Kang F R, et al. *Polymers for Advanced Technologies*, 2020, 31 (4):654–664.
- [27] Chen Z Q, et al. *Journal of Applied Polymer Science*, 2021, 138 (37). DOI: 10.1002/app.50950.
- [28] Kiliaris P, et al. *Macromolecular Materials and Engineering*, 2008, 293(9):740–751.
- [29] Sun X Y, et al. *Journal of Materials Science*, 2021, 56(31):17 860–17 873.
- [30] 赵永真, 等. *矿冶工程*, 2018, 38(5):141–143.
- Zhao Yongzhen, et al. *Mining and Metallurgical Engineering*, 2018, 38(5):141–143.
- [31] 王鲁静, 等. *工程塑料应用*, 2022, 50(10):120–124, 130.
- Wang Lujing, et al. *Engineering Plastics Application*, 2022, 50 (10):120–124, 130.
- [32] Luo F, et al. *Journal of thermal analysis and calorimetry*, 2017, 129(2):767–775.
- [33] 秦铭骏, 等. *工程塑料应用*, 2019, 47(9):139–143.
- Qin Mingjun, et al. *Engineering Plastics Application*, 2019, 47(9): 139–143.
- [34] Ge H, et al. *Journal of Hazardous Materials*, 2015, 294:186–194.
- [35] Li Y, et al. *Polymer Composites*, 2021, 42(4):1 818–1 834.
- [36] Cheng C, et al. *RSC Advances*, 2021, 11(33):20 391–20 402.
- [37] Zhang G, et al. *Polymer Bulletin*, 2021, 78(9):5 337–5 354.
- [38] Jiang L, et al. *Journal of Applied Polymer Science*, 2023, 140(10). DOI: 10.1002/app.53589.
- [39] Xu M J, et al. *Polymers for Advanced Technologies*, 2017, 28(11): 1 382–1 395.