文章编号:1671-7872(2026)05-0481-16



董曦曦　南京航空航天大学长聘教授、博士生导师,国家级青年人才,江苏特聘教授。现任先进成形技术与装备全国重点实验室共建单位负责人及学术带头人。博士毕业于清华大学,曾于英国国家液态金属工程中心LiME和BCAST工作。研究方向为高性能轻质合金结构材料-设计-制造一体协同超轻化智能铸造成形,形成涵盖合金智能设计、结构深度轻量化、智能装备的特色体系。团队研制的高强韧铝合金、耐热镁合金等达国际先进水平,在汽车、航空航天等领域实现转化应用;自主开发的智能轻量化设计软件与铸造装备实现重点领域突破。主持国家自然科学基金优青/面上项目、领域重点基金项目及英国国家级创新项目、欧盟企业攻关项目等。在*Acta Mater*等期刊发表论文70余篇,申请发明专利40余件。兼任世界铸造大会科学委员会委员、中国机械工程学会铸造/塑性工程分会理事及多刊编委,曾获英国国家级奖、国际镁科学技术奖等多项荣誉。

机器学习辅助镁基材料性能预测与设计进展

彭国胜[1],王　辉[1],杜博文[1],熊落保[2],乔　勇[2],董曦曦[3]

(1. 安徽工业大学 材料科学与工程学院,安徽 马鞍山 243032;2. 江苏永臻科技股份有限公司 永臻绿色能源材料研究院,江苏 常州 213000;3. 南京航空航天大学 机电学院,南京 210016)

摘要:镁基材料在轻量化结构件、可降解植入体、固态储氢及镁空气电池等领域具有重要应用前景,其性能受成分、加工工艺、微观组织、界面状态与服役环境等多因素耦合影响,传统逐项实验难以覆盖由此产生的高维参数空间。近年来,机器学习在该领域的应用已从拉伸性能预测拓展至加工组织调控、腐蚀与生物降解评价、储氢材料筛选以及镁空气电池阳极和电解液设计。本文围绕数据收集与特征构建、模型验证与解释、候选筛选与实验反馈等环节,评述代表性研究的建模方法及其材料学结论,并比较结构镁合金、生物医用镁合金、镁基储氢材料与镁空气电池在设计变量、验证方式与评价尺度上的差异。现有研究表明,成分和常规工艺数据相对充足,但组织演化、服役环境、失效样本及跨来源验证仍较薄弱;基于随机划分所得的高精度结果,尚不能替代新合金、新工艺或独立实验的检验。未来应着力构建可追溯的多源数据库,在候选筛选中引入相稳定性、组织演化与电化学约束,并通过多目标优化结合实验反馈,提升设计结果的可制备性与复现性。

关键词:机器学习;镁基材料;镁合金;材料信息学;性能预测;反向设计;主动学习

中图分类号:TG 146.2　　**文献标志码:**A　　**doi:**10.12415/j.issn.1671-7872.26091

收稿日期:2026-06-27;**修回日期:**2026-07-19

基金项目:国家重点研发计划项目(2021YFF0600504);安徽省大学生创新创业计划(S202610360426)

作者简介:彭国胜(1978—),男,湖南长沙人,博士,讲师,主要研究方向为铝/镁合金结构及功能材料。

通信作者:董曦曦(1989—),男,江苏南京人,博士,教授,博士生导师,主要研究方向为高性能轻质合金结构材料-设计-制造一体协同超轻化智能铸造成形。

引文格式:彭国胜,王辉,杜博文,等. 机器学习辅助镁基材料性能预测与设计进展[J]. 安徽工业大学学报(自然科学版),2026,43(5):481-496.

Citation: PENG G S, WANG H, DU B W, et al. Research Progress in Machine Learning-assisted Property Prediction and Design of Mg-based Materials[J]. Journal of Anhui University of Technology (Natural Science), 2026, 43(5):481-496.

Research Progress in Machine Learning-assisted Property Prediction and Design of Mg-based Materials

PENG Guosheng[1], WANG Hui[1], DU Bowen[1], XIONG Luobao[2], QIAO Yong[2], DONG Xixi[3]

(1. School of Materials Science & Engineering, Anhui University of Technology, Maanshan 243032, China;
2. Yonz Green Energy Materials Research Institute, Yonz Technology Co., Ltd., Changzhou 213000, China;
3. College of Mechanical and Electrical Engineering, Nanjing University of Aeronautics and Astronautics, 210016 Nanjing, China)

Abstract: Magnesium-based materials hold significant application prospects in lightweight structural components, biodegradable implants, solid-state hydrogen storage, and Mg-air batteries. Their performance is governed by the combined effects of composition, processing, microstructure, interfacial state, and service environment, while conventional trial-and-error experiments are inadequate to cover the resulting high-dimensional parameter space. In recent years, machine learning has been applied to these materials, extending from tensile property prediction to processing–microstructure control, corrosion and biodegradation evaluation, hydrogen-storage material screening, and anode and electrolyte design for Mg-air batteries. This review focused on three interconnected aspects, namely data collection and feature engineering, model validation and interpretation, and candidate screening with experimental feedback, and critically evaluated the modeling methodologies and materials-related findings of representative studies. A cross-system comparison was presented among structural magnesium alloys, biomedical magnesium alloys, Mg-based hydrogen-storage materials, and Mg-air batteries, with emphasis on their differences in design variables, validation strategies, and evaluation metrics. Existing studies have demonstrated that compositional and conventional processing data are relatively abundant, whereas information on microstructural evolution, service environments, failed specimens, and cross-source validation remains insufficient. High-accuracy results obtained from random data splits cannot replace the validation through new alloys, new processing routes, or independent experiments. Future efforts should be directed toward establishing traceable and multi-source databases, incorporating constraints of phase stability, microstructural evolution, and electrochemistry into candidate screening, and enhancing the fabricability and reproducibility of designed materials through multi-objective optimization coupled with experimental feedback.

Keywords: machine learning; Mg-based materials; magnesium alloys; materials informatics; property prediction; inverse design; active learning

镁及镁合金的密度约为铝合金的 2/3、钢铁的 1/4, 兼具较高的比强度、比刚度和阻尼性能, 在交通运输、航空航天、轨道交通及计算机、通信和消费电子 (computer, communication and consumer electronics, 3C) 产品轻量化中具有应用优势[1−3]。然而, 其工程化推广仍受室温塑性不足、加工开裂、强织构和腐蚀敏感等问题制约[4−6]。镁基材料范畴不限于结构合金: MgH_2 具有较高理论储氢容量, 镁空气电池则利用镁阳极氧化与空气阴极还原供能[7−10]。尽管上述材料性能指标各异, 但均涉及成分、热加工、晶粒与织构、第二相、表面膜以及温度、介质和载荷条件之间的耦合关系。第一性原理与热力学计算可提供相稳定性、形成能与界面反应等信息[11−12], 但对实际工艺过程及不同实验条件下的数据仍有限。

随着数据积累, 机器学习 (machine learning, ML) 逐渐进入镁基材料研究领域。早期工作主要依据成分和加工参数预测屈服强度、抗拉强度与伸长率, 此后逐步纳入晶粒尺寸、织构、孪晶、析出相及局部组织特征。研究对象从结构镁合金拓展至可降解合金的强度–腐蚀协同设计、储氢材料的容量与反应温度, 以及镁空气电池的放电电压、阳极利用率和电解液添加剂。已有综述较系统地介绍了上述进展, 涵盖 ML 算法及其在镁合金设计、加工和性能预测中的应用[13−15], 既展示了数据驱动方法的潜力, 也揭示了数据库口径不统一、相近样本在训练集与测试集间交叉混入、组织和环境变量缺失等问题。然而, 算法层面的精度比较并非当前最紧迫的任务。更值得关注的是: 模型结论在何种成分、工

艺和测试边界内成立？推荐结果能否转化为可制备、可测的真实材料方案？回答这两个问题, 必须正视不同材料体系间数据形态与验证成本的显著差异——结构合金的组织表征成本高但标准相对成熟, 生物医用材料涉及腐蚀与生物相容性的多目标冲突, 储氢和电池体系则常受稀疏数据与动态工况的叠加困扰。若对不同体系采用统一特征模板或单一精度指标衡量, 势必掩盖其本质差别。

已有综述多从算法类别或性能任务维度归纳 ML 应用。然而, 对数据来源可追溯性、材料状态完整性、验证是否超出原数据库范围以及候选方案是否经实验闭环验证等问题, 尚缺乏系统性横向比较。为此, 本文以数据与状态表征、候选设计与实验反馈、材料学认识 3 个相互衔接的层面为主线, 对结构镁合金、生物可降解合金、储氢材料和镁空气电池四类体系的证据基础进行比较, 重点辨析可复现的材料规律及其适用条件。

1　镁基材料机器学习数据与验证

现有镁合金数据库与建模实践表明, 模型误差常源自材料状态记录不完整。相同名义成分经铸造、挤压、轧制或热处理后, 晶粒、织构和第二相均会发生改变; 腐蚀、储氢及电池数据随介质、温度、压力及测试时间而变化。数据整理方式、特征表达方法与验证策略共同限定了模型结论的可信范围。

1.1　数据收集

现有数据主要源自公开文献和课题组实验。文献汇总可覆盖较宽的成分与工艺范围, 但测试标准和记录粒度参差不齐; 单一课题组数据条件较为统一, 然样本量和合金范围通常有限。Ghorbani 等[16]汇集 916 条镁合金样本, 以 30 种合金元素描述成分, 并以铸造、热处理、挤压和剧烈塑性变形等标签区分材料状态, 表明同一牌号不能视为单一数据点, 加工历史须纳入样本定义。目前镁基材料领域尚缺乏标准化数据库, 已有研究多依赖各课题组自建数据集, 格式和记录标准的差异加大了整合难度。

1.1.1　任务相关的数据字段要求

不同任务对数据字段要求各异: 拉伸数据需含试样方向、应变速率和热处理状态; 腐蚀数据除成分外, 还应记录介质、参比电极、温度、浸泡时间和表面处理; 储氢数据需含活化方式、吸放氢温度、压力与循环次数; 镁空气电池需记录阳极组织、电解液、空气阴极、放电电流密度和终止条件。缺少上述字段, 易将测试条件差异误判为成分效应[16−17]。

目标量口径与标签定义也应保持一致。屈服强度需注明取值方法与加载方向, 伸长率需区分均匀伸长与断后伸长; 由失重、析氢和电化学方法所得的腐蚀结果含义不同, 不宜合并为同一标签。储氢容量须说明质量基准, 电池容量则应区分按阳极还是活性镁质量归一化。若数据来源与标签定义不一致, 即便增加特征或更换算法, 仍会保留偏差[17−19]。

跨文献数据的格式统一不止于表格层面的整理。质量分数与原子分数、工程应力与真实应力、不同电化学参比尺度及腐蚀速率单位均需换算; 熔炼气氛、取样方向或测试温度等未报告信息应保留为空缺, 不宜用总体均值替代。材料数据生态研究强调, 需记录数据来源、测试标准、样本批次和处理过程[17], 这些元数据也是识别重复样本、实验室偏差和异常记录的重要依据。此外, 从图表数字化获取的数据仍含读图误差, 此类样本可用于扩展趋势范围, 但应标记提取方法, 不宜与原始数据等权重使用; 综述与原始论文重复收录的数据也需去重。

1.1.2　样本分布偏差与统计独立性

样本分布偏差和样本间非独立性, 都会使模型高估其泛化能力。AZ31, AZ91 及 Mg–稀土 (rare earth, RE) 合金的数据相对充裕, 而兼具极低腐蚀速率、低温放氢、高阳极利用率或强塑性等特性的样本较少。燃烧、热裂、严重偏析、加工开裂、腐蚀失控及快速极化等失败结果较少公开, 若数据库仅保留成功实验, 模型所预测的可制备区域可能宽于实际范围[16−17]。1 条应力–应变曲线可导出屈服强度、抗拉强度和伸长率, 连续浸泡实验可记录多个时间点的腐蚀数据, 电子背散射衍射 (electron backscatter diffraction, EBSD) 图中包含大量相邻晶粒的取向信息。若将这些派生结果视为彼此独立的样本随机拆分, 训练集与测试集会共享同一炉次或同一原始信号源。因此, 数据表应为炉次、试样及原始文件设置层级标识, 并按最高层级完成分组划分[17−19]。

1.2　特征构建

现有镁合金数据集通常将输入信息分为成分、工艺、组织与服役条件 4 个层级[16,18−19]。元素含量描述名义配方; 均匀化、挤压、轧制及时效记录加工历史; 晶粒尺寸、织构、孪晶和第二相反映材料状态; 温度、介质、压力及电流密度则限定测试场景。不同任务可按需选取与目标性能直接相关的层级, 但

不宜用成分变量替代缺失的工艺、组织或环境。

1.2.1 成分与组织特征

元素含量还可转换为平均原子半径、尺寸失配、电负性差、价电子浓度、混合焓及相稳定性等描述符。Ghorbani 等[18] 在后续建模中将成分、加工状态、原子参数与热力学特征组合，用以预测镁合金力学性能。派生描述符便于比较不同元素组合，却无法替代原始配方与工艺记录——相同平均原子参数可能对应不同的元素配比和相组成。

显微组织变量既可充当输入特征，也可视为成分与工艺作用后的中间状态。晶粒尺寸、织构、Schmid 因子及第二相的类型、尺寸与分布，分别关联晶界强化、滑移与孪晶、析出强化和微电偶腐蚀。已有建模与外部验证表明，若缺失组织信息，模型难以区分相同成分在不同加工状态下的性能差异[18−19]。

1.2.2 曲线与图像特征及特征筛选

腐蚀、储氢和电池任务还涉及曲线、图像及时间序列数据。阻抗谱、极化曲线、析氢曲线、扫描电子显微镜 (scanning electron microscope, SEM) 图像及 EBSD 取向图所含信息均多于单个标量。稳妥的做法是同时保留原始信号、提取特征及记录实验条件，以便区分材料固有差异与测试过程差异。

特征筛选不应脱离变量的材料学含义。相关系数、正则化和树模型重要性常从一组共线变量中择一保留，例如元素含量与相分数、挤压温度与晶粒尺寸往往同步变化。若更换样本或划分方式后入选变量明显改变，则筛选结果尚不稳固。对物理意义明确但缺失较多的组织或环境变量，应报告缺失范围并限定模型的适用状态[17−19]。

1.3 模型验证与误差

随机划分适合于检查模型对已有数据邻近区域关系的拟合能力，但易将相近成分、相似工艺或同一文献来源的样本分至训练集与测试集两侧[17−19]。因此，多来源数据库宜按合金体系、文献来源、工艺状态或采集时间分组，且同一炉次、同一曲线或同一原始样品派生的数据必须置于同一侧。

1.3.1 独立验证与误差指标

Wiese 等[19] 在 Mg–Gd 挤压合金研究中，通过另行制备样品并开展拉伸、压缩及显微组织表征，将成分范围、设备条件及组织状态变化带来的误差纳入评估。相较于从原始数据集中二次抽取测试集，这类新增独立样品提供的证据更具说服力。对于腐蚀或电池体系等任务，独立验证应做到实验批次更换，同时确保介质条件和测试流程全程可追溯。

回归建模常用决定系数 (R^2)、平均绝对误差 (mean absolute error, MAE) 和均方根误差 (root mean square error, RMSE) 评估误差，但这些指标无法脱离量纲和分布范围进行横向比较：屈服强度、腐蚀电流密度、储氢容量和放电电压在物理意义和数值尺度上截然不同，相同的 R^2 并不代表相同的工程误差。此外，面向反向设计时，还需额外报告目标偏差、约束满足率及实验命中情况。

1.3.2 适用域与不确定度

模型应明确适用域，可借助成分和工艺上下限、最近邻距离、局部样本密度或概率模型给出的预测方差，判断候选点是否仍处于训练数据支持的区域。Wiese 等[19] 通过新增样品验证表明，当候选点远离已有成分或加工状态时，内部测试精度不能代替实际制备结果，测试条件也应纳入适用域考量。

验证结果还应报告不同数据划分方式下的波动情况。小样本条件下，单次随机划分可能偶然将少数高性能样本全部归入训练集或测试集，导致 R^2 和特征排序出现显著变化；重复分组验证、按时间留出和按合金家族留出分别用于检验误差波动、时序预测能力和跨体系迁移能力，所回答的问题各不相同[17−19]。模型给出的不确定度需经实际误差校准：置信区间在外部样品上的覆盖率若过低，则不宜用于指导实验安排；若区间过宽，又会失去筛选价值。候选点附近的样本数量、测量误差及不同模型之间的分歧，可共同用于风险分级。对于安全或成本敏感的成分，还需通过重复实验加以确认。

1.4 模型解释

模型通过验证后，研究者往往进一步借助可解释性工具从中提取材料学认识。Shapley 加性解释 (Shapley additive explanations, SHAP) 和偏依赖图 (partial dependence plot, PDP) 是其中最为常用的方法，其数学定义与算法基础见 Lundberg 等[20] 的工作。这类结果描述的仅是给定数据分布中的统计关系：元素含量排在前列，并不等于固溶或析出强化已被证实；环境变量贡献显著，也不能直接据此推出界面反应机理。解释偏差多源于变量间的耦合。例如，稀土含量、热处理制度与析出相往往成组变化，挤压温度常与晶粒尺寸及织构强度相关；腐蚀数据中的合金牌号、表面处理与介质条件同样很少完全独立。此时，重要性数值只能说明模型利用了哪一组相关信息，无法将贡献唯一归因于其中某个变量[18,20]。

1.4.1 统计线索的材料学检验

统计线索能否转化为材料学认识，取决于其是

否与相应表征相符。强度相关变量可同晶粒、织构、析出相及位错结构对照验证; 腐蚀性能的排序需结合表面膜、第二相微电偶和电化学曲线; 储氢与电池候选则应满足热力学或电化学约束。若变量重要性排序与这些观察相悖, 应优先排查样本偏倚、共线性和实验条件[18−20]。成分、工艺及环境对照可进一步拆分混杂因素: 相近成分下改变时效制度, 可判断析出组织是否承担了模型归给合金元素的作用; 相同阳极和电流密度下改变添加剂, 便于区分电解液效应。围绕关键变量设置可比较的材料状态, 是模型解释进入实验检验的基本条件。

1.4.2　解释图表的阅读约束

解释图表应同时标注数据密度与变量分布范围。偏依赖图上的拐点, 仅当其位于相变温度、固溶度边界或电化学阈值附近时, 才值得进一步检验; 若拐点处于样本稀疏区, 或仅在单一模型中出现排序一致性, 则不宜做出确定的物理推断。综述中, 模型解释的作用在于归纳可验证的材料线索, 而非替代组织观察、热力学分析或电化学证据。

2　面向镁基材料的机器学习设计策略

从性能预测走向材料设计, 需依次明确可调变量与材料约束、筛除不可制备候选、在多个性能目标间作出取舍, 并依据实验结果修正后续选择。对镁基材料而言, 成分、加工窗口、组织状态与服役条件须在搜索前界定, 否则数学上的高性能组合可能无法熔炼、加工或测试。

2.1　设计与材料约束

变量可分为直接控制量与状态描述量。元素含量、挤压温度、挤压速度、热处理制度及电解液配方可由实验直接调整; 原子半径差、相稳定性属派生描述符, 晶粒尺寸、织构及第二相含量则属中间状态。前者构成搜索坐标, 后者用于施加约束或设定组织目标。然而, 设计空间的维度受限于现有数据集的覆盖范围。镁基材料可用合金元素逾 20 种, 若考虑连续含量变化及挤压、热处理等工艺参数, 潜在组合数远超当前任一数据库的样本量 (通常为 10^2~10^3 量级)。因此, 搜索前须依据物理冶金知识缩减变量维度, 优先选取已有热力学数据支持的合金体系、固定部分工艺窗口或采用成分替代策略, 否则高维空间中的优化结果往往缺乏统计支撑。Pilania[21] 将材料、表征、学习模型与设计先验知识相关联 (图 1), 该框架的优势在于明确了表征与模型之间的反馈关系, 但其通用架构未区分不同材料体系的约束差异。对镁基材料而言, 固溶度限制、氧化烧损、加工开裂倾向及测试条件的敏感性, 均需作为独立于模型之外的硬约束嵌入设计循环。此外, 还需补入设备能力和测试制度等可执行约束。

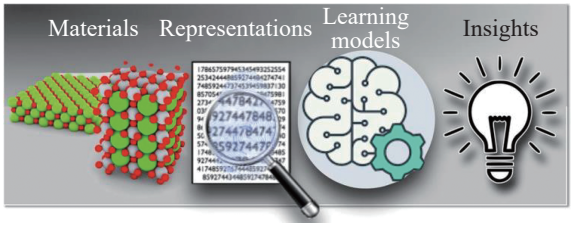


图1　材料表征、学习模型与设计先验知识之间的关系[21]

Fig. 1　Relationship among materials representations, learning models and design prior insights[21]

目标性能与实验条件共同决定设计空间。Xue 等[22] 以目标性能限定候选范围, Hattrick–Simpers 等[23] 通过组成、结构、性能映射连接实验变量与表征量, Zuo 等[24] 则利用贝叶斯优化和图学习在性能与不确定度间安排采样。对应到镁基材料, 结构合金需满足相稳定性与成形窗口, 生物医用合金需兼顾强塑性与降解速率, 储氢材料与镁空气电池则分别受热力学与放电制度约束。数据驱动材料研究发现, 候选变量需与实际合成及表征流程中的可调参数相对应, 模型输出才可能转化为实验方案[25−26]: 高强挤压合金的搜索变量应包含可调成分与挤压参数, 腐蚀候选需固定或记录介质与表面状态, 镁空气电池候选则需同时规定电流密度与电解液条件。设计边界越清楚, 实验中的性能差异越易追溯到具体变量。现有自适应设计与自动化研究多给出名义候选或下一次采样位置, 但对元素烧损、温度波动及时间偏差的容差分析仍不充分[22−26]。对于镁基材料, 除单个最优点外, 还应报告邻近成分、工艺范围及性能预测变化; 若最优性能仅出现在极窄区间, 后续熔炼及放大制备的复现风险将显著增加。

2.2　候选筛选与实验可行性

大规模候选先经稳定性与工艺边界初筛, 再由代理模型依据性能预测和不确定度安排少量实验。自适应设计与贝叶斯优化可将采样导向性能改进或数据边界补充区域[22−24], 自动化计算与实验平台则缩短制备、表征和结果回流周期[25−26]。镁合金熔炼中的氧化烧损、元素挥发、偏析及热裂尚难仅凭平台参数识别, 仍需作为独立的可行性条件处理。

在镁合金力学性能筛选中, Zhu 等[27] 利用多来源数据预测屈服强度、抗拉强度及伸长率, 并用新

制备样品检验; Jain 等[28] 针对高压压铸镁合金建模, 以独立公开数据验证。两项研究均先限定成分和加工状态, 再评价预测误差, 表明即使性能指标相同, 压铸态与挤压态样品也不能视为同一设计空间。实际筛选时, 应先排除违反相稳定性、设备能力及测试制度的组合, 再比较预测性能。新增样品或跨来源数据可揭示模型离开原范围后的误差[27−28], 因而训练数据密集区的候选可用于性能验证, 边界附近的候选更适合补充数据, 明显外推的高预测点不宜直接推荐。判断依据可参照最近邻距离或局部样本密度: 若候选点与训练集中最近邻的欧氏距离小于训练集平均最近邻距离的某阈值 (如 1.5 倍), 则可进入性能验证; 超出该范围时, 预测值应视为趋势参考, 优先用于数据补充。候选数量应与实验通量匹配: 自适应设计通常在性能较高与信息不足的区域间分配有限实验[22,24], 高通量筛选与自动化平台则适合并行比较更多方案[25−26]。一次仅能熔炼少量合金时, 候选应在成分–工艺空间中分散采样, 避免集中于同一局部区域; 电解液可并行测试较多配方时, 则可同时安排高性能与高不确定度候选。现有研究较多报告入选结果, 对淘汰原因和制备失败记录较少[22−28]。违反固溶度极限、易形成脆性相、超出设备温度范围或与电化学测试条件不匹配的方案, 应分别保留不可行标签, 既说明高预测值未进入实验的原因, 也为下一轮模型收紧约束提供依据。

2.3 多目标优化与实验反馈

镁基材料的设计目标普遍存在折中, 优化过程中需在多个性能指标间寻求平衡, 而非将多目标压缩为单一分数。结构件需兼顾强度与塑性, 植入体需协调承载与降解, 储氢材料需平衡容量、反应温度与循环稳定性, 镁空气电池则同时关注放电电压、容量及阳极利用率。与此同时, 可制备性、成本及实验误差亦构成实际决策的硬约束[29]。本节从多目标优化和实验反馈两个层面梳理现有研究进展。

2.3.1 多目标优化

简单加权法将多目标压缩为依赖权重的单一分数, 难以反映不同应用场景的实际取舍。Mi 等[30] 将 Mg–Mn 基合金元素含量及挤压参数作为可调输入, 采用人工神经网络 (artificial neural network, ANN) 和粒子群优化 (particle swarm optimization, PSO), 依据目标屈服强度、抗拉强度及伸长率反推配方与工艺。4 种候选材料经熔炼、挤压和拉伸实验后均接近设定目标, 屈服强度相对预测误差分别为 10.7%, 9.7%, 8.6% 和 6.3%, 表明反向设计的可行性取决于搜索变量是否与实际配料及工艺参数相对应。

多目标结果应区分模型给出的 Pareto 候选与经实验确认的材料。Xu 等[29] 归纳了多目标设计中的目标权衡、约束及不确定度处理; Mi 等[30] 验证了 4 组目标性能附近的候选, 但未覆盖完整 Pareto 前沿。现有镁合金研究对成分误差、温度波动及组织离散下的稳健性报告仍较少。因此, 候选比较除预测值外, 还应给出目标偏差、约束满足情况及邻近参数响应变化, 避免将单个折中点描述为普遍最优解。

2.3.2 实验反馈

闭环设计要求新实验改变下一轮候选, 而非将预测值重复写入数据库。人在回路方法允许研究者依据相图、熔炼安全及设备条件否决方案[31], 该干预在镁基材料中尤为重要, 因现有数据库难以编码熔炼过程中的氧化烧损和开裂倾向。闭环自主材料探索与优化 (closed-loop autonomous materials exploration and optimization, CAMEO) 平台可在表征中更新模型[32]; 黑箱优化则根据新增目标值重新安排实验[33]。主动学习依据不确定度选取高信息量样本, 适用于高成本材料任务[34]。上述框架在镁基材料中的实施方式取决于实验周期: 合金熔炼、挤压、长期腐蚀及循环储氢等长周期实验, 通常采用模型推荐、人工复核、少量实验验证及数据库更新的半闭环流程; 而电解液配方与短时放电测试因调整周期较短, 更易于实现连续迭代。无论何种流程, 每轮实验条件及负结果均须完整记录, 而实验数据是否及时返回模型, 则是判断闭环程度的关键。

Ghorbani 等[35] 以高斯过程回归为代理模型, 采用置信上限 (upper confidence bound, UCB) 在预测性能与不确定度之间选择候选。该研究从既有镁合金数据库中抽取初始数据, 并以数据库中的已知性能或随机森林预测值代替新实验结果, 通过遗憾分析检验顺序优化过程, 属于模拟主动学习验证, 而非真实的“制备–测试–更新”闭环。其结果说明不确定度可用于安排候选顺序, 但其在实际合金开发中的适用性仍需通过逐轮制备与性能测试确认。

实验回传的数据结构应在实验前确定。除目标性能外, 还需保存实际成分、工艺偏差、组织表征、测试环境及测量误差; 候选制备失败、性能低于预期或测试中途终止也属于有效信息。只有这些结果被用于收紧约束、修正不确定度或改变下一轮采样, 模型与实验之间才形成可检验的设计循环[31−35]。反馈延迟是镁基材料闭环设计面临的现

实约束。熔炼、加工、组织表征和长时性能测试的周期可能长达数周, 在此期间模型无法利用新数据更新。因此, 主动学习的采样策略需在每轮实验启动前预留足够的候选冗余, 而非等待上一轮结果再决定下一轮单点。闭环实验还应设置停止条件: 连续若干轮候选性能不再提高、模型不确定度降至实验误差范围, 或新增方案无法满足成本与设备约束时, 应结束当前搜索并重新定义目标。现有材料闭环与黑箱优化研究均将目标更新与采样停止作为流程的组成部分[33−35]; 对长周期镁基材料任务, 阶段性复核数据质量比追求完全自动化更为实际。总体而言, 实验周期短的体系 (电解液筛选、短时腐蚀测试) 更适宜全闭环迭代; 而涉及熔炼、加工和长时性能评估的合金开发, 半闭环流程配合阶段性人工复核更为现实。

3　机器学习在镁基材料中的应用

机器学习在镁基材料中的应用已涉及力学性能、加工工艺、腐蚀与生物降解、储氢及镁空气电池五类方向, 如图 2 所示[13−14]。这些方向均从数据中寻找材料状态与性能之间的关联, 但各自的证据尺度并不相同: 拉伸性能依赖于加工状态, 腐蚀与降解受介质和时间控制, 储氢及电池性能则分别受到热力学与电化学边界的约束。图 2 将五类方向纳入同一框架, 但这并不意味着可以采用统一评价尺度。结构合金侧重强塑性及其组织来源, 腐蚀与降解离不开介质与时间因素, 储氢同时受容量上限与反应动力学制约, 镁空气电池还涉及阳极–电解液–阴极的耦合关系。跨体系可共享的是数据追溯、约束筛选及实验回流方法; 具体特征与性能判据仍应由相应材料过程本身决定。

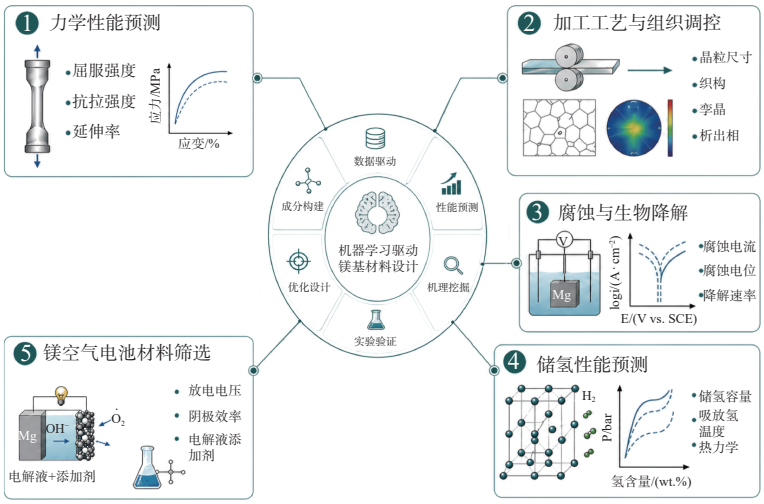


图2　机器学习辅助镁基材料设计的五类应用方向及其材料要素

Fig. 2　Five application directions and materials elements in machine-learning-assisted Mg-based materials design

3.1　力学性能预测

力学性能预测是机器学习在镁基材料中研究历史最长、数据积累最为丰富的方向, 核心任务是从成分、工艺及组织特征出发预测屈服强度、抗拉强度与伸长率。结构合金关注强度–塑性协同及其组织来源, 生物医用合金则需在满足强塑性的前提下为降解速率留出约束空间。二者的数据基础与建模目标虽有重叠, 但筛选逻辑并不相同。

3.1.1　成分、工艺与宏观力学性能

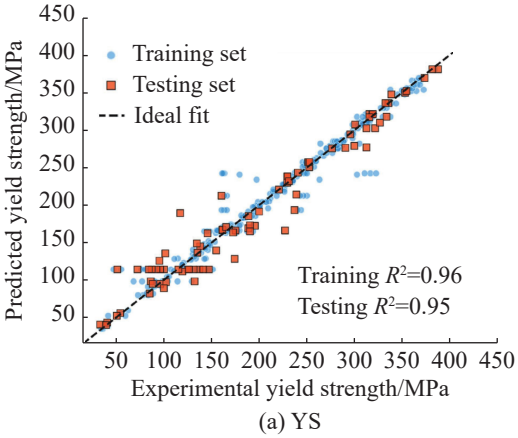
力学性能研究通常以屈服强度 (yield strength, YS)、抗拉强度 (ultimate tensile strength, UTS) 和伸长率 (elongation, EL) 为目标。Xu 等[36] 收集 112 条 AZ31 合金数据, 将合金成分、均匀化、挤压、轧制及退火参数用于 ANN 与支持向量机 (support vector machine, SVM) 建模, 并通过挤压样品检验预测。ANN 对新增样品 YS, UTS 和 EL 的相对误差分别为 5.4%, 23% 和 272%, SVM 对应为 28%, 25% 和 143%; 2 种模型在原数据划分中均表现较好, 却均明显高估了外部样品的伸长率。这揭示: 训练集内部良好拟合并不等同于跨样本外推能力, 尤其以伸长率为目标时, 模型对加工历史变化的响应远比强度和硬度更敏感。该结果既表明, 即便在同一牌号内, 仅依赖成分和宏观工艺参数进行外推预测亦存在高风险, 这也为后续将显微组织特征作为必要模型输入提供了直接证据[36]。引入显微组织后, 同一成分下的性能差异才有可能被进一步分开。Suh 等[37] 在 Mg–Al–Zn 合金中同时考虑时效制度、析出组织和晶粒, 用于分析拉伸、压缩屈服及拉压不对称性, 结果表明成分变

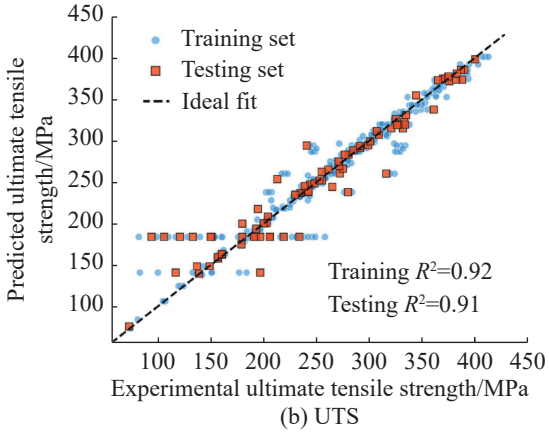
量不能替代时效引起的第二相变化。另一研究[38]采用 12 个成分、挤压、组织和织构变量，将有限实测数据经约 39 倍增强形成 1 179 个数据点，ANN 对不同拉伸性能的 R^2 为 0.842~0.997。SHAP 分析将 Al 和 Mn 分别识别为强度与伸长率的重要变量，并联系固溶、第二相和织构讨论其作用；但这些扩增数据并非 1 179 个独立实验样本，较高的内部拟合结果仍需在新增合金上检验。

稀土镁合金的强塑性关系更为复杂。Mg–Gd 和 Mg–Y 体系中，固溶与析出强化、织构弱化及非基面滑移可能同时参与变形[39]；针对 Mg–RE 合金的预测研究主要通过稀土含量、热处理状态、晶粒及织构间接表征这些作用[40]。相组成和取向信息缺失时，稀土含量易成为多种机制的替代变量，所得关系不宜直接外推到另一类 Mg–RE 合金。其他加工状态也存在相同问题：AZ31B 温变形数据反映温度与应变路径的作用[41]，等通道转角挤压 AZ61 复合材料还包含组织细化和增强相影响[42]；面向多元高强镁合金的研究虽扩大了成分范围，却更易受高强样本集中于少数挤压或时效制度的影响[43]。因此，不同模型精度的横向比较，其有效性严格受限于材料状态与实验条件的一致性。脱离此前提，仅凭 R^2 或误差值评判模型优劣缺乏意义。

3.1.2 生物医用镁合金的强塑性筛选

生物医用镁合金的力学筛选不能只追求最高强度。Nandal 等[44]将屈服强度、抗拉强度及伸长率置于同一预测框架，比较 6 种模型后发现，类别提升算法 (categorical boosting, CatBoost) 对 YS, UTS 和 EL 的 R^2 分别为 0.95, 0.92 和 0.90，并用独立 Mg–Zn–Mn 数据检验泛化能力，训练集与测试集的实验值–预测值关系见图 3。





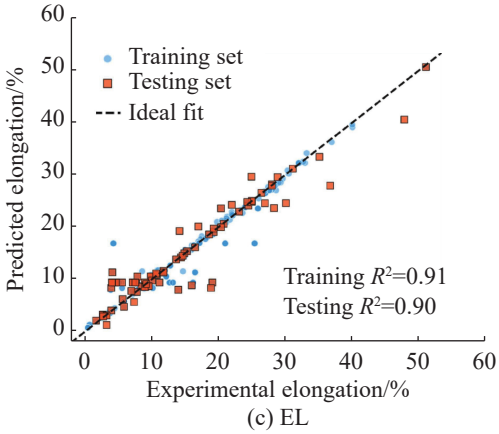


图3 可降解镁合金 YS, UTS 和 EL 的实验值与机器学习预测值[44]

Fig. 3 Experimental and machine-learning-predicted YS, UTS and EL of resorbable magnesium alloys[44]

3 项指标并列处理，使候选选择保留了强度与塑性之间的制约；图 3 的 3 个子图依次对应 YS, UTS 和 EL，散点偏离对角线的程度反映了各指标的预测误差，这种分项结果比综合分数更能揭示模型对塑性和强度的拟合不同步——这对植入合金尤其重要，因为塑性预测偏差可能改变候选在成形及早期承载阶段的判断。此外，该研究还绘制了 Zn–Mn 成分与强塑性的预测图，但降解仅作为成分筛选的约束条件，并未直接预测[44]。因此，这类力学预测结果适合用于缩小植入合金的成分范围，后续仍需将强塑性筛选与同一加工状态下的降解数据配对，才能形成完整的植入体设计依据。

加工组织对植入合金强塑性的影响在两类研究中得到体现。Li 等[45]以严重塑性变形方法、变形道次和温度为输入，比较自适应神经模糊推理系统 (adaptive neuro-fuzzy inference system, ANFIS)、SVM、基因表达式编程和遗传编程对超细晶 ZK60 合金 YS, UTS 及 EL 的预测，所有模拟的相关系数绝对值均高于 0.8，其中基因表达式编程误差最低。Hou

等[46]整理 365 组 Mg–Zn–(Y, Nd, Gd)–Zr 合金数据, 将均匀化、挤压、固溶及时效参数与成分共同输入 6 种单模型, 再用堆叠集成预测 3 项拉伸性能。前者样本条件一致但范围较窄, 后者覆盖多种工艺却更依赖文献记录的完整性; 两者均只能完成力学前置筛选, 加工形成的组织能否在腐蚀过程中维持承载能力, 仍需结合降解和生物学实验判断。

综合现有研究, 晶粒细化、织构调控、固溶和第二相是力学模型中反复出现的材料因素, 但其作用随加工状态、取样方向及合金体系而变。单牌号研究利于分辨工艺影响, 多元数据库利于扩展成分范围; 前者覆盖面有限, 后者易混入来源差异。强塑性协同最终仍需落实到可重复的成分–工艺–组织组合[36–46]。

3.2　加工工艺调控

挤压、轧制、锻造及等通道转角挤压通过动态再结晶、晶粒长大、织构演化和析出行为改变材料性能。加工建模既可将组织作为输出以选择工艺路线, 也可将组织作为输入解释性能离散; 关键是保留工艺批次、试样位置与局部组织之间的层级关系。

3.2.1　工艺路线与局部组织

Mi 等[47]以 Mn, Al, Zn, Sn 和 Ca 含量及挤压温度、速度为变量, 区分细晶与超细晶组织, 提出 4 条 Mg–Mn 基合金成分–工艺路线。4 种新合金经挤压后平均晶粒尺寸分别为 0.78, 2.87, 1.97 和 4.35 μm, 均进入该研究设定的超细晶范围, 晶粒尺寸预测的实验验证准确率超过 80%; 模型将 Al 含量与挤压温度列为主要因素, Mn 与 Zn 次之。与单纯报告分类准确率相比, 具体成分–挤压条件下形成的晶粒尺度可直接接受实验检验, 但细晶标签仍不能替代再结晶分数、织构和第二相等连续组织信息。

晶粒尺度研究中的样本单位和目标各异。Gui 等[48]在 Mg–4Y–3Nd–2Sm–0.5Zr 合金初始组织中统计 297 个晶粒, 其中 68 个在真应变 0.05 时发生 {10~12}孪生; 以晶粒直径、邻晶数及 Schmid 因子等 8 项特征建模, 相关性集成模型的受试者工作特征曲线下面积 (area under the receiver operating characteristic curve, AUC) 为 0.880, 高于极端梯度提升 (extreme gradient boosting, XGBoost) 的 0.756, 说明局部应力与相邻晶粒约束不能由整块试样平均值表示。Guan 等[49]使用 138 组数据预测 Hall–Petch 斜率, ANN 总体优于随机森林 (random forest, RF), 但其目标是跨合金的经验参数; 晶界强化效率还受合金体系、变形历史、织构和加载条件影响。Zhang 等[50]则在 2 种织构的 Mg–0.47Ca 试样中直接标记晶界损伤, 损伤晶界分别占 5.8% 和 7.5%, 优化模型的 AUC 为 73.7% 和 84.1%, 相邻晶粒 c 轴错配、平均晶粒尺寸及晶界相对载荷方向为主要特征。3 项工作分别以晶粒、合金数据点和晶界为样本, 精度不能脱离样本层级与加载状态直接横向排序。

3.2.2　空间响应与数据增强

Yu 等[51]考察八道次孔型轧制 AZ31 合金横截面的显微硬度分布, 比较 ANN 与生成对抗网络 (generative adversarial network, GAN) 辅助 ANN 的预测效果, 如图 4 所示。

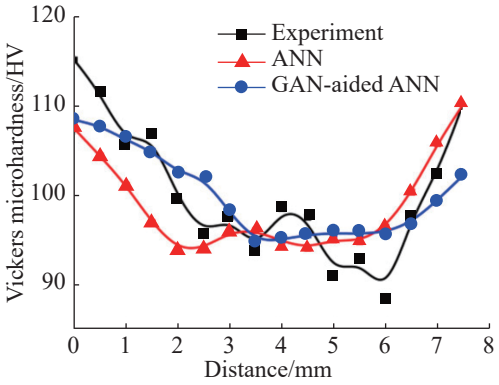


图4　八道次孔型轧制 AZ31 镁合金横截面维氏显微硬度的实验值与预测值[51]

Fig. 4　Experimental and predicted Vickers microhardness across the cross-section of eight-pass caliber-rolled AZ31[51]

图 4 中横坐标为距横截面起点的距离, 纵坐标为维氏显微硬度, 黑、红、蓝曲线分别表示实验值、ANN 预测值和 GAN 辅助 ANN 预测值。硬度沿横截面明显起伏, 说明局部应变、再结晶和织构并不均匀; GAN 改善了小样本拟合, 但测点仍需保留空间坐标, 不能将相邻位置随机拆分为训练集与测试集。

Byun 等[52]针对 ZK60 合金不同退火状态与加载方向, 利用 GAN 辅助门控循环单元 (gated recurrent unit, GRU) 处理小样本变形序列。数据增强改善了各向异性响应预测, 却未增加新的真实组织状态, 基面织构、孪晶启动及非基面滑移仍需通过 EBSD 或晶体塑性分析解释。结合 Mi 等[47]的工艺路线、Gui 等[48]的孪晶形核、Guan 等[49]和 Zhang 等[50]的晶界研究以及 Yu 等[51]的位置相关硬度结果可看出, 加工建模已由整块试样的平均性能拓展至晶粒、晶界及空间响应等层级。模型若用于反推工艺窗口, 应保留初始组织、分道次变形、试样位置及加载方向; 数据增强可降低小样本波动, 但不能替代新的加工批次与局部表征。

3.3　腐蚀与生物降解

腐蚀与生物降解数据受介质环境和时间尺度影响显著, 其测试指标和建模方式区别于力学性能。

3.3.1 腐蚀行为预测

镁合金腐蚀受杂质、第二相微电偶、晶粒取向、表面膜及介质等多因素协同控制[5−6,53−55]。腐蚀电位、电流密度、阻抗与析氢速率从不同维度反映腐蚀行为，即便同一合金，在不同 Cl^- 浓度、pH、温度或浸泡时间下也可能呈现相异的耐蚀排序，因此环境和测试制度须作为模型结论的必要边界条件。Moses 等[54] 对比了线性回归、决策树、极端随机树、随机森林、K 近邻、XGBoost 和人工神经网络，并用独立实验数据检验预测效果；Lu 等[55] 则评估随机森林、多元线性回归、支持向量回归 (support vector regression, SVR) 和 XGBoost，发现随机森林对腐蚀电位的预测较优。两项研究均以成分为主要输入特征，适用范围仍受限于数据库所覆盖的介质和测试条件。

Pagadala 等[53] 在 Mg–*x*Sn(*x*=1%, 5%, 10%, 质量分数) 合金的实验中发现，腐蚀标签的选择对建模结果影响显著。该研究在模拟体液中分别浸泡 24, 48, 72 h，从 Nyquist 图和 Bode 图中提取 100 个电化学阻抗谱 (electrochemical impedance spectroscopy, EIS) 数据点，从动电位极化曲线中获得 5 400 个 Tafel 数据点。尽管数据源于同一组合金与浸泡制度，XGBoost 对 EIS 数据的预测精度 (R^2=0.961 0) 远高于 Tafel 数据 (R^2=0.614 5)，表明不同电化学测试所表征的腐蚀行为存在本质差异。该工作通过对比同一体系下不同电化学测试方法的预测精度，验证了“约束筛选”中标签定义一致性对模型成败的决定性作用。一般而言，腐蚀电流密度反映短时电化学响应，失重与析氢速率表征一定周期内的平均腐蚀速率，而局部形貌则用于判别腐蚀是否集中于特定组织区域[5−6,53−55]。因此，将不同测试条件下的结果进行简单合并，形成单一的“腐蚀性能”标签，在方法论上是错误的，这会抹除关键的介质与时间信息，导致模型学习到虚假的关联。

3.3.2 生物降解

在生物降解研究领域，面向腐蚀与析氢过程的信号建模正逐步深入，相关方法已从静态终点预测拓展至动态过程描述。Pagadala 等[53] 以 Mg–Sn 合金的电化学测试数据为基础，训练了多种机器学习模型，其中 XGBoost 在腐蚀预测中表现最优。Zhao 等[56] 则进一步引入时序结构，将 13 种镁合金的 SEM, EBSD, 成分信息与 20 组连续 100 h 析氢曲线整合为多层图注意网络 (图 5)，并在未参与训练的新合金上检验 0~100 h 析氢动力学，模型预测 R^2 超过 0.90。结果显示，电阻率、密度和第二相比例是影响降解行为的主要驱动因素。图 5 右侧验证图中，横坐标为析氢时间，纵坐标为单位面积析氢体积，实线代表实验曲线，散点为模型预测值。该验证策略不仅比较终点析氢量，更注重整条时间曲线的拟合程度，相比仅依赖单一腐蚀电位的评价方式，更能体现模型对降解动力学过程的描述能力[56]。

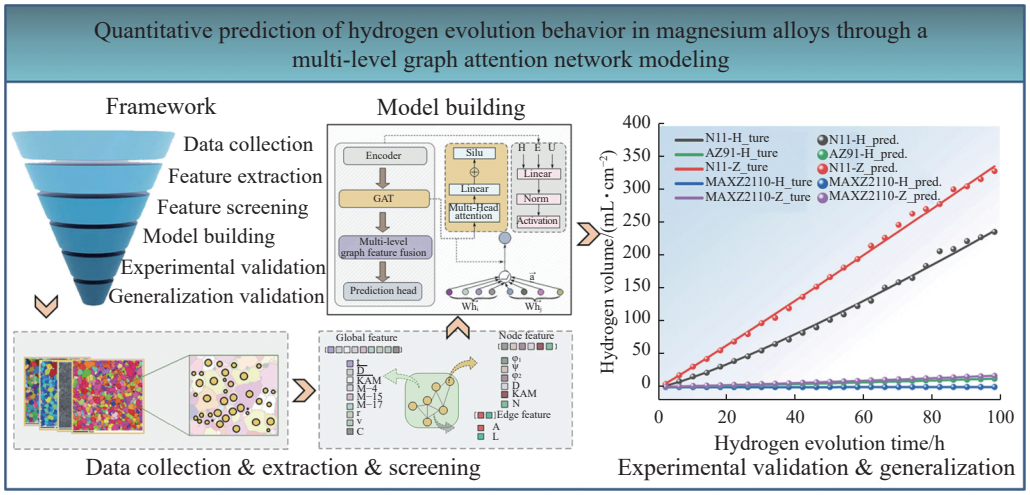


图5 多层图注意力网络预测镁合金析氢腐蚀行为的流程与验证[56]

Fig. 5 Workflow and validation of hydrogen-evolution corrosion prediction using a multi-layer graph attention network[56]

生物医用镁合金在降解过程中还需兼顾力学完整性、局部腐蚀均匀性和生物学响应[57−58]。植入体早期需承担载荷，随后以可控速率降解；增材制造形成的孔隙结构和表面状态会同时影响力学性能与腐蚀路径[57]，而腐蚀产物、局部碱化及析氢则影响细胞与组织反应[58]，因而短时电化学指标只能描述降解过程的部分特征。Peng 等[59] 以 UTS, EL 和腐蚀电位为多目标，制备了 Mg–4.6Zn–0.3Y–0.2Mn–0.1Nd–0.1Gd 合金，实验测得 UTS 为 320 MPa, EL 为 22%，在 37 ℃ 模拟体液中的腐蚀电位为−1.60 V。拉伸与电化学结果的联合检验表明，可降解合金设计需在一致的成分和加工状态下协调强度、塑性与腐蚀行为。

Raguraman 等[60] 以 ZX10 合金建立了同一批试样的加工–组织–性能对应关系, 采用 Pearson 相关分析和最小绝对收缩与选择算子 (least absolute shrinkage and selection operator, LASSO) 筛选晶粒尺寸、位错密度及 $Ca_2Mg_6Zn_3$ 相等组织变量, 并以留一交叉验证选择模型。移除等通道转角挤压数据后, 部分组织变量间相关系数明显改变, 说明小样本中变量排序易受个别工艺状态影响。Ma 等[61] 针对等离子体电解氧化涂层 WE43 合金, 以不同涂层微结构的相场模拟生成训练数据, 经体外实验检验; 多输入卷积神经网络 (convolutional neural network, CNN) 对腐蚀曲线的预测优于单输入模型, 编码器–解码器对腐蚀界面演化的平均误差约 1%。这两项工作分别从组织状态和涂层界面角度, 弥补了仅预测初始腐蚀电位的研究不足。

上述研究分别预测电化学响应、析氢曲线、组织–腐蚀关系和涂层腐蚀界面, 尚无法直接给出植入体服役寿命。合理的数据组织方式应是同时保存力学保持、局部损伤、表面状态与生理环境, 并明确各指标的测试节点。只有建立一致的时间对应关系, 模型才可能讨论承载能力随降解过程的演变规律。

3.4　储氢性能预测

MgH_2 的理论质量储氢密度约为 7.6%, 但其热力学稳定性较高、吸放氢动力学较慢, 通常需较高工作温度[7]。合金化、纳米化、催化剂和复合化可改变反应动力学, 同时也引入元素含量、粒径、相组成、制备工艺、温度、压力和循环次数等变量, 模型因而需兼顾容量与反应条件。Malinova 等[7] 较早建立两层前馈 ANN, 以 Mg 基合金中 24 种可能出现的元素为初始输入, 并采用 Levenberg–Marquardt 算法和贝叶斯正则化训练, 分别预测储氢容量、放氢温度和压力; 多数元素含量增加会降低质量储氢容量, 部分元素却能降低放氢温度, 显示两类指标并非同向变化。Rahnama 等[62] 利用美国能源部多类金属氢化物数据库, 比较了线性回归、神经网络、贝叶斯线性回归和提升决策树, 其中提升决策树对储氢含量的预测 R^2 为 0.83, 材料类别、温度和生成热为主要影响变量, 该结果反映的是跨体系统计规律, 并非专门的镁基数据库。Suwarno 等[63] 整理的 314 组数据来自 Zr–Ti 基 AB_2 氢化物, 发现 Ni, Cr 和 Mn 的生成焓、Laves 相组成与储氢容量显著关联, 并将其作为邻近体系的特征分析参照。

Dong 等[64] 汇集了 826 条镁基储氢实验记录, 经信息完整性筛选后, 最大吸氢量和最大放氢量模型分别使用 183 和 113 个样本。该研究以物理性质、热力学性质和工艺条件为输入; 测试集中, 梯度提升回归 (gradient boosting regression, GBR) 对最大吸氢量的预测 R^2 为 0.947, 多层感知机 (multilayer perceptron, MLP) 对最大放氢量的预测 R^2 为 0.922。图 6 概括了三类输入及建模流程, 其中 Input, Modeling 和 Prediction 分别表示输入、建模和预测。

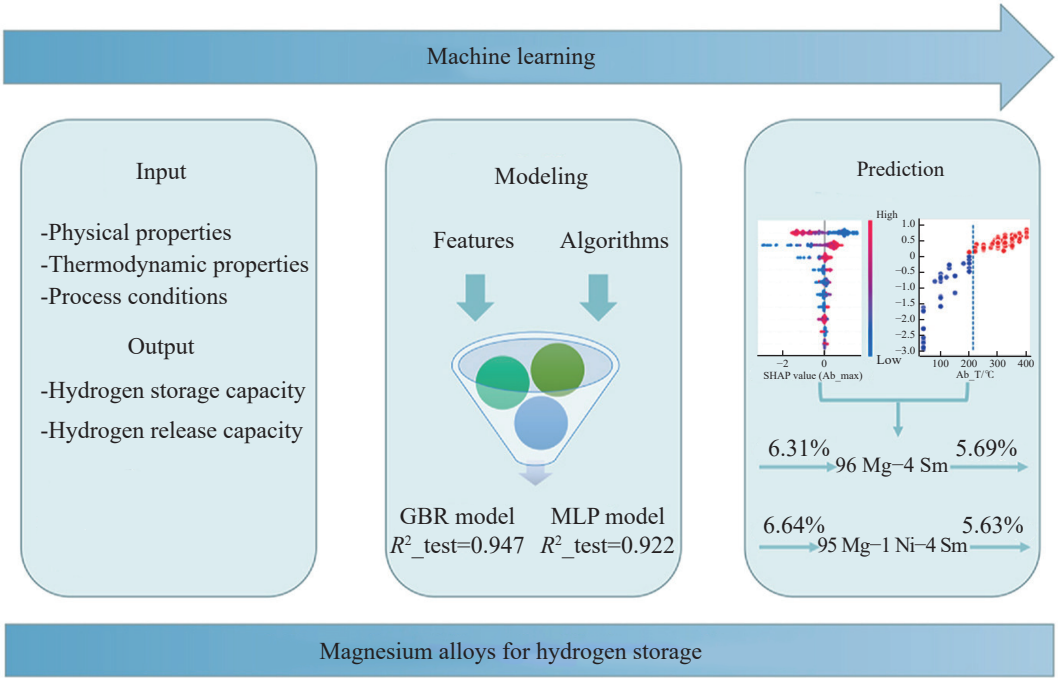


图6　镁基储氢合金设计中物理性质、热力学性质和工艺条件的变量构建[64]

Fig. 6　Construction of physical, thermodynamic and processing variables for machine-learning design of Mg-based hydrogen-storage alloys[64]

模型进一步筛选出 96Mg–4Sm 和 95Mg–1Ni–4Sm 两种成分: 前者预测最大吸氢量和放氢量分别为 6.31% 和 5.69%, 后者分别为 6.64% 和 5.63%, 工作温度均控制在 300 ℃ 以下。上述数值属于模型筛选结果, 仍需通过合金制备、相组成分析、活化过程及多循环实验加以确认。

镁基储氢研究的模型输出受化学计量、相组成和反应条件共同限制[7,64]。最大容量不能脱离相比例讨论, 放氢温度与生成焓、扩散及界面反应有关, 催化剂主要改变动力学而不必然提高理论容量。现有机器学习工作已能完成容量预测和候选筛选, 但独立合成、多循环稳定性及平台压力验证仍较少。数据库需区分块体、粉末、纳米复合物和催化剂负载样品, 并记录球磨、保护气氛、粒径和氧含量。对于模型预测出的低温高容量材料, 须经实验严格审视: 先核查其相组成, 继而通过压力–组成等温线及循环实验综合评估其反应动力学与可逆性。

3.5 镁空气电池材料筛选

镁空气电池依靠镁阳极氧化和空气阴极还原输出电能。实际放电时, 阳极自腐蚀和析氢会消耗活性镁, $Mg(OH)_2$/MgO 产物膜又会增加极化, 使放电电压、容量和阳极利用率均低于理论值[8–10]; 提高阳极活性有助于维持电压, 却可能加快自腐蚀, 因此阳极筛选需在电压、容量与利用率之间寻求动态平衡。有效变量跨越成分、组织和界面演化: 超细晶 AZ31 的放电行为表明晶粒与表面活性会影响阳极反应[65]。超高纯 Mg 研究揭示了痕量杂质与局部腐蚀的联系[66], 放电过程中的表面演化模型则将 $Mg(OH)_2$ 覆盖率、膜层厚度、孔隙率及局部 pH 随时间的变化纳入描述[67]。这些工作分别对应初始组织、杂质水平和工作中的界面状态; 若数据库只保留合金牌号与终点容量, 模型便无法区分自腐蚀损失、产物膜阻塞和有效放电反应。

阳极合金的多目标筛选已有实验闭环和独立制备两类证据。Liang 等[68] 将物理描述符、Pareto 前沿、实验反馈和生成数据反馈相结合, 在约 35 万种成分组合中筛得 Mg–1Ga–1Ca–0.5In, 研究流程见图 7; 该阳极在 1 mA•cm^{-2} 下的利用率为 64%±5.5%、电压为 1.80 V, 在 10 mA•cm^{-2} 下的利用率为 64%±0.5%、电压为 1.57 V。实验和密度泛函计算将其性能归因于活性第二相引起的晶界活化以及溶质–Mg 轨道杂化产生的晶内抑制, 这项工作具备逐轮实验反馈, 与仅在既有数据库中模拟选点的主动学习不同[68]。Ling 等[69] 以 XGBoost 同时预测电池电压、阳极利用率、比容量和比能量, 从模型结果中得到 22 种潜在二元镁合金, 并实际制备了 Mg–Ca, Mg–Zn, Mg–Sn, Mg–Al 和 Mg–Li 五类阳极。其中 Mg–Ca 在 10 mA•cm^{-2} 下的比能量达到 1 797.1 Wh•kg^{-1}, 而 Mg–Li 表现最差, 实验排序与模型预测一致; SEM、动电位极化和实时析氢测试进一步用于解释阳极溶解与自腐蚀行为。与单目标电压预测相比, 两项研究均保留了性能折中及其界面证据。

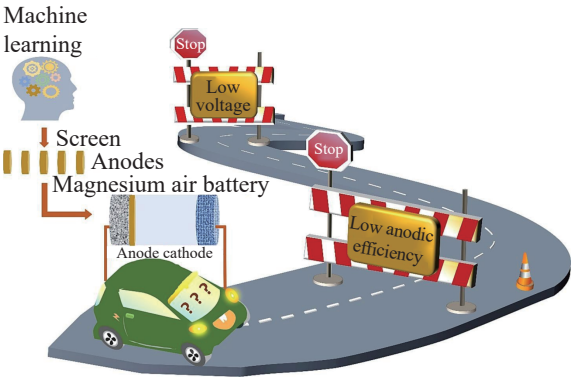


图7 主动学习缓解镁空气电池阳极利用率-放电电压折中的研究思路[68]

Fig. 7 Active-learning strategy for mitigating the utilization-efficiency-voltage trade-off in Mg-air batteries[68]

电解液从另一侧影响阳极的溶解–钝化平衡。水系金属空气电池研究表明, 离子组成会影响产物膜和界面传质[70], 无氯电解液则可降低氯离子诱发的局部腐蚀与析氢[71], 同一阳极在不同配方中可能呈现不同的电压和利用率, 因而阳极模型与电解液模型不宜在缺少共同测试条件时直接拼接。已有实验采用 Mg–Ca 阳极添加剂、协同添加剂混合物、铁络合剂、双层凝胶及柠檬酸钠等途径调节放电行为[72–76]。其中络合或抑制型添加剂主要作用于析氢、溶解和膜层稳定, 凝胶结构还影响离子传输与电解液保持。Wu 等[77] 采用机器学习辅助的自适应实验逐轮筛选水系电解液添加剂, 所得 2,3–dihydroxynaphthalene 用于 Mg–0.2Ca–air 电池时, 电压达 1.82 V, 阳极利用率为 83%, 比能量为 3.37 kWh•kg^{-1}。添加剂任务虽适合较快迭代, 但分子结构、浓度、溶解度和界面吸附需与放电条件同时记录, 单一分子名称不足以支撑跨电解液的迁移预测。

既有阳极和电解液研究采用的电流密度、电解液浓度、空气阴极配置、终止电压和放电时间并不一致。由于阳极利用率、比容量和比能量还取决于理论容量、残余镁测量及质量归一方式, 跨研究的性能对比需建立在相同测试基准上。因此, 比较时应同时保留阳极成分与组织、电解液与阴极配置、

放电条件、析氢量及产物膜信息, 避免将测试条件较宽松时获得的最高值直接视为材料优势。现阶段宜在统一阳极尺寸、表面处理、电流密度和空气阴极条件下测试一组常见 Mg–Al, Mg–Zn, Mg–Ca 及高纯 Mg 样品, 同步测量开路自腐蚀、放电平台、容量和利用率, 形成可供跨实验室复核的小型基准集; 添加剂研究还应记录分子结构、浓度、溶解度、析氢和产物膜, 使电压变化能够与界面反应相互印证。此类对照比拼接不同测试制度下的最优值更能反映阳极和电解液本身的作用。

3.6　不同镁基材料体系的横向比较

五类应用在数据来源、模型目标和实验代价上差异明显。力学性能比较需区分 YS, UTS 和 EL 等单项指标、强塑积等综合指标以及完整应力–应变响应; 只有牌号、加工状态和实验制度接近时, 模型排序才具有可比性。腐蚀和电池研究还需考虑介质与时间因素, 储氢数据则同时受相组成和热力学条件约束。表 1 从方法论和实验证据层面比较了代表性研究的数据类型、建模任务、验证方式和主要局限。

由表 1 可见, 力学与加工研究已有新增样品、局部组织和不同取向试样等实验证据, 腐蚀、生物降解及镁空气电池也开始用联合实验检验候选材料, 储氢研究则较多停留在历史数据留出与性能筛选。上述差异主要源于样品制备和测试周期, 而非某类算法天然更具优势。新增样品用于检验制备与测量偏差, 跨来源数据用于暴露实验室间差异, 组织和电化学表征则用于判断模型排序是否符合材料行为。因此, 测试集 R^2 不能单独概括研究质量, 还需说明结论在哪一层证据上成立。

表 1　镁基材料机器学习代表性研究的横向比较

Tab. 1　Cross-system comparison of representative machine-learning studies on Mg-based materials

材料体系	主要数据	模型与任务	验证方式	材料学结论	主要局限
结构镁合金与生物医用力学性能[36–46]	成分、加工、晶粒、织构、第二相、YS、UTS及EL	ANN, SVR与集成模型; 力学性能预测和强塑性筛选	随机或分组测试; 新增样品及拉伸实验	加工和组织决定同牌号内的性能差异, 强度与塑性需联合评价	牌号及工艺分布不均, 跨合金体系和跨加工状态验证不足
加工与组织[19,47–52]	挤压/轧制参数、EBSD局部特征、硬度分布、晶界及变形序列	神经网络、树模型、核方法及GAN–GRU; 组织分类与局部响应	新增Mg–Gd实验、局部组织标签、不同方向试样及增强数据测试	可识别细晶路线、孪晶形核、晶界损伤及位置相关硬度	局部样本少, 增强数据难以替代独立实验和原位表征
腐蚀与生物降解[53–61]	成分、介质、电化学谱图、SEM/EBSD图像和析氢时间序列	提升模型、集成回归、图注意力网络及多目标优化	独立实验曲线、新合金拉伸与电化学联合验证	介质和时间需与成分共同解释, 力学与降解可协同优化	表面状态、pH及测试制度不统一, 跨实验室泛化受限
镁基储氢材料[7,64]	成分、物理/热力学性质、温度、压力、工艺和容量	ANN, GBR, MLP, SVR和RF; 容量预测与候选筛选	留出或交叉验证, 独立合成和循环实验较少	热力学与工艺变量共同决定容量及反应温度	相组成、粒径、催化剂及循环稳定性记录不足
镁空气电池[65–77]	阳极、电解液/添加剂、放电条件、电压、利用率及容量	主动学习、提升模型及多目标筛选; 阳极与添加剂设计	候选阳极制备放电和添加剂实验验证	可处理电压–利用率折中, 并可将搜索扩展至电解液分子	电流密度、阴极、终止电压和产物膜缺少统一标准

4　结论与展望

本文综述了机器学习在结构镁合金、生物医用镁合金、镁基储氢材料和镁空气电池中的应用。相关研究已从力学性能拟合拓展至加工组织调控、腐蚀与生物降解评价、储氢材料筛选以及电池阳极和电解液设计。现有结果表明, 机器学习能够捕捉成分、工艺、组织与性能之间的非线性关系, 有效减少候选材料的实验筛选数量。然而, 当前数据仍以名义成分、常规工艺和短期性能为主, 局部组织信息、长期服役数据、失败实验记录及跨实验室比对结果较为匮乏, 部分模型的有效范围仍局限于原始样本空间附近, 其泛化能力尚未得到充分验证。后续研究可从以下几个方面展开。

1) 完善镁基材料数据的记录与共享。数据库除成分与性能外, 还应纳入工艺参数、组织特征、服役环境、测试标准、炉次、试样状态及测量误差等信息。燃烧、加工开裂、偏析、严重析氢、腐蚀失控和快速极化等失败结果, 能够反映材料的制备与服役边界, 是定义模型适用范围的关键依据, 不应在数据整理时被剔除。成功与失败实验同时记录, 模型才能准确地判断候选材料的可行范围, 避免在物理

上不可能或工艺上不可行的区域内做出无效预测。

2) 改进模型验证与可靠性评价。随机划分数据时，同一文献或相近成分的样本可能同时进入训练集与测试集，所得误差容易偏低，难以反映模型在未知材料上的真实表现。按文献来源、合金家族或实验批次进行留出，并采用新增材料开展独立验证，更接近模型的实际使用场景，也更能暴露过拟合风险。高斯过程回归可给出预测结果及其不确定度[78]，但其置信区间的可靠性仍需通过新实验校准；物理信息学习可引入相稳定性、守恒关系和性能上限等约束[79]，但无法替代真实的组织、界面与服役数据。对训练范围以外的候选材料，应优先进行实验验证，而非依赖模型外推。

3) 建立分材料体系的实验反馈与评价基准。不同材料体系研究节奏差异显著，反馈策略应与之匹配。合金熔炼、热加工、长期腐蚀及循环储氢实验周期较长，模型推荐需结合相图、设备能力和安全条件进行复核，方可进入制备环节；电解液配方与短时放电实验周转较快，可采用逐轮更新的闭环方式。每轮实验应将成功、失败及未达预期的结果返回模型，用于调整下一轮候选选择，形成预测、实验、反馈、再预测的闭环。现阶段可先在单一材料体系内统一数据字段、测试条件与标签定义，再逐步建立跨实验室保留集，用于比较候选材料在不同条件下的重复制备结果。数据来源、划分规则与适用范围保持透明，才能客观判断模型改进的实际效果。

参考文献:

[1] XU T C, YANG Y, PENG X D, et al. Overview of advancement and development trend on magnesium alloy[J]. Journal of Magnesium and Alloys, 2019, 7(3):536−544.

[2] NIE J F, SHIN K S, ZENG Z R. Microstructure, deformation, and property of wrought magnesium alloys[J]. Metallurgical and Materials Transactions A, 2020, 51(12):6045−6109.

[3] YANG Y, XIONG X M, CHEN J, et al. Research advances of magnesium and magnesium alloys worldwide in 2022[J]. Journal of Magnesium and Alloys, 2023, 11(8):2611−2654.

[4] 赵磊杰, 马立峰, 韩廷状, 等. 变形镁合金轧制成形研究进展 [J]. 材料导报, 2020, 34(21):21135−21145.
ZHAO L J, MA L F, HAN T Z, et al. Research progress of wrought magnesium alloy rolling forming[J]. Materials Reports, 2020, 34(21):21135−21145.

[5] ESMAILY M, SVENSSON J E, FAJARDO S, et al. Fundamentals and advances in magnesium alloy corrosion[J]. Progress in Materials Science, 2017, 89:92−193.

[6] SONG G L, ATRENS A. Recently deepened insights regarding Mg corrosion and advanced engineering applications of Mg alloys[J]. Journal of Magnesium and Alloys, 2023, 11(11):3948−3991.

[7] MALINOVA T, GUO Z X. Artificial neural network modelling of hydrogen storage properties of Mg-based alloys[J]. Materials Science and Engineering A, 2004, 365(1/2):219−227.

[8] DENG M, WANG L Q, VAGHEFINAZARI B, et al. High-energy and durable aqueous magnesium batteries: recent advances and perspectives[J]. Energy Storage Materials, 2021, 43:238−247.

[9] LI S B, LI X N, ZHAO C C, et al. Recent progress of electrolytes for Mg-air batteries: a review[J]. Journal of Magnesium and Alloys, 2024, 12(11):4395−4421.

[10] HUANG X, DAI Q W, XIANG Q, et al. Microstructure design of advanced magnesium-air battery anodes[J]. Journal of Magnesium and Alloys, 2024, 12(2):443−464.

[11] SCHLEDER G R, PADILHA A C M, ACOSTA C M, et al. From DFT to machine learning: recent approaches to materials science: a review[J]. Journal of Physics: Materials, 2019, 2(3):032001.

[12] SCHMIDT J, MARQUES M R G, BOTTI S, et al. Recent advances and applications of machine learning in solid-state materials science[J]. NPJ Computational Materials, 2019, 5:83.

[13] 吴铮, 李全安, 陈晓亚, 等. 机器学习在镁合金应用中的研究进展 [J]. 工程科学学报, 2024, 46(10):1797−1811.
WU Z, LI Q A, CHEN X Y, et al. Applications of machine learning on magnesium alloys[J]. Chinese Journal of Engineering, 2024, 46(10):1797−1811.

[14] CHENG Y, WEI C, HUANG H, et al. A brief review of machine learning-assisted Mg alloy design, processing, and property predictions[J]. Journal of Materials Research and Technology, 2024, 30:8108−8127.

[15] HART G L, MUELLER T, TOHER C, et al. Machine learning for alloys[J]. Nature Reviews Materials, 2021, 6(8):730−755.

[16] GHORBANI M, BOLEY M, NAKASHIMA P N H, et al. A machine learning approach for accelerated design of magnesium alloys. Part A: alloy data and property space[J]. Journal of Magnesium and Alloys, 2023, 11(10):3620−3633.

[17] BLAISZIK B, WARD L, SCHWARTING M, et al. A data ecosystem to support machine learning in materials science[J]. MRS Communications, 2019, 9(4):1125−1133.

[18] GHORBANI M, BOLEY M, NAKASHIMA P N H, et al. A machine learning approach for accelerated design of magnesium alloys. Part B: regression and property prediction[J]. Journal of Magnesium and Alloys, 2023, 11(11):4197−4205.

[19] WIESE B, BERGER S, BOHLEN J, et al. Property design of extruded magnesium-gadolinium alloys through machine learning[J]. Materials Today Communications, 2023, 36:106566.

[20] LUNDBERG S M, LEE S I. A unified approach to interpreting model predictions[C]//Advances in Neural Information Processing Systems 30. Long Beach: Curran Associates, Inc, 2017:4765−4774.

[21] PILANIA G. Machine learning in materials science: from explainable predictions to autonomous design[J]. Computational Materials Science, 2021, 193:110360.

[22] XUE D Z, BALACHANDRAN P V, HOGDEN J, et al.

Accelerated search for materials with targeted properties by adaptive design[J]. Nature Communications, 2016, 7:11241.
[23] HATTRICK−SIMPERS J R, GREGOIRE J M, KUSNE A G. Perspective: composition-structure-property mapping in high-throughput experiments: turning data into knowledge[J]. APL Materials, 2016, 4(5):053211.
[24] ZUO Y X, QIN M, CHEN C, et al. Accelerating materials discovery with Bayesian optimization and graph deep learning[J]. Materials Today, 2021, 51:126−135.
[25] JUAN Y, DAI Y, YANG Y, et al. Accelerating materials discovery using machine learning[J]. Journal of Materials Science & Technology, 2021, 79:178−190.
[26] PYZER−KNAPP E O, PITERA J W, JOHN P, et al. Accelerating materials discovery using artificial intelligence, high performance computing and robotics[J]. NPJ Computational Materials, 2022, 8:84.
[27] ZHU G S, DU X M, SUN D D. Machine learning accelerated design of magnesium alloys with high strength and high ductility[J]. Materials Today Communications, 2025, 44:111894.
[28] JAIN R, JAIN S, DEWANGAN S K, et al. Prediction of alloying element effects on the mechanical behavior of high-pressure die-cast Mg-based alloys[J]. Journal of Magnesium and Alloys, 2025, 13(8):3819−3828.
[29] XU P C, CHEN H L, LI M J, et al. Multi-objective optimization in machine learning assisted materials design and discovery[J]. Journal of Materials Informatics, 2025, 5:26.
[30] MI X X, TIAN L J, TANG A T, et al. A reverse design model for high-performance and low-cost magnesium alloys by machine learning[J]. Computational Materials Science, 2022, 201:110881.
[31] MOSQUEIRA−REY E, HERNANDEZ−PEREIRA E, ALONSO-RIOS D, et al. Human-in-the-loop machine learning: a state of the art[J]. Artificial Intelligence Review, 2023, 56(4):3005−3054.
[32] KUSNE A G, YU H, WU C, et al. On-the-fly closed-loop materials discovery via Bayesian active learning[J]. Nature Communications, 2020, 11:5966.
[33] TERAYAMA K, SUMITA M, TAMURA R, et al. Black-box optimization for automated discovery[J]. Accounts of Chemical Research, 2021, 54(6):1334−1346.
[34] LOOKMAN T, BALACHANDRAN P V, XUE D, et al. Active learning in materials science with emphasis on adaptive sampling using uncertainties for targeted design[J]. NPJ Computational Materials, 2019, 5:21.
[35] GHORBANI M, BOLEY M, NAKASHIMA P N H, et al. An active machine learning approach for optimal design of magnesium alloys using Bayesian optimisation[J]. Scientific Reports, 2024, 14:8299.
[36] XU X N, WANG L Y, ZHU G M, et al. Predicting tensile properties of AZ31 magnesium alloys by machine learning[J]. JOM, 2020, 72(11):3935−3942.
[37] SUH J S, SUH B C, LEE S E, et al. Quantitative analysis of mechanical properties associated with aging treatment and microstructure in Mg−Al−Zn alloys through machine learning[J]. Journal of Materials Science & Technology, 2022, 107:52−64.
[38] SUH J S, KIM Y M, YIM C D, et al. Interpretable machine learning-based analysis of mechanical properties of extruded Mg−Al−Zn−Mn−Ca−Y alloys[J]. Journal of Alloys and Compounds, 2023, 968:172007.
[39] ZHANG J, LIU S, WU R Z, et al. Recent developments in high-strength Mg−RE-based alloys: focusing on Mg−Gd and Mg−Y systems[J]. Journal of Magnesium and Alloys, 2018, 6(3):277−291.
[40] LU J, CHEN Y, XU M, et al. Prediction of mechanical properties of Mg-rare earth alloys by machine learning[J]. Materials Research Express, 2022, 9(10):106519.
[41] MURUGESAN M, YU J H, CHUNG W, et al. Hybrid artificial neural network-based models to investigate deformation behavior of AZ31B magnesium alloy at warm tensile deformation[J]. Materials, 2023, 16(15):5308.
[42] HUANG S J, MOSE M P, KANNAIYAN S. A study of the mechanical properties of AZ61 magnesium composite after equal channel angular processing in conjunction with machine learning[J]. Materials Today Communications, 2022, 33:104707.
[43] LIU Y W, WANG L Y, ZHANG H, et al. Accelerated development of high-strength magnesium alloys by machine learning[J]. Metallurgical and Materials Transactions A, 2021, 52(3):943−954.
[44] NANDAL V, BENEŠ V, BALÁŽ P, et al. Accelerating the design of resorbable magnesium alloys: a machine learning approach to property prediction[J]. Materials & Design, 2026, 266:116060.
[45] LI M H, MESBAH M, FALLAHPOUR A, et al. Mechanical strength estimation of ultrafine-grained magnesium implant by neural-based predictive machine learning[J]. Materials Letters, 2021, 305:130627.
[46] HOU H B, WANG J F, YE L, et al. Prediction of mechanical properties of biomedical magnesium alloys based on ensemble machine learning[J]. Materials Letters, 2023, 348:134605.
[47] MI X X, JING X R, WANG H L, et al. A machine learning enabled ultra-fine grain design strategy of Mg−Mn-based alloys[J]. Journal of Materials Research and Technology, 2023, 23:4576−4588.
[48] GUI Y W, LI Q A, ZHU K G, et al. A combined machine learning and EBSD approach for the prediction of {10−12} twin nucleation in an Mg−RE alloy[J]. Materials Today Communications, 2021, 27:102282.
[49] GUAN B, CHEN C, XIN Y C, et al. Predicting the Hall−Petch slope of magnesium alloys by machine learning[J]. Journal of Magnesium and Alloys, 2024, 12(11):4436−4442.
[50] ZHANG S, ZHU G M, FAN Y H, et al. A machine learning study of grain boundary damage in Mg alloy[J]. Materials Science and Engineering A, 2023, 867:144721.
[51] YU J, OH S J, BAEK S, et al. Predicting the effect of processing parameters on caliber-rolled mg alloys through machine learning[J]. Applied Sciences, 2022, 12(20):10646.
[52] BYUN S, YU J, CHEON S, et al. Enhanced prediction of anisotropic deformation behavior using machine learning with data augmentation[J]. Journal of Magnesium and Alloys, 2024, 12(1):186−196.
[53] PAGADALA N D, JAISWAL J, RADHA R. Machine learning based corrosion prediction of as cast Mg−Sn alloys

for biomedical applications[J]. Materials Today Communications, 2023, 35:106108.
[54] MOSES A, CHEN D, WAN P, et al. Prediction of electrochemical corrosion behavior of magnesium alloy using machine learning methods[J]. Materials Today Communications, 2023, 37:107285.
[55] LU Z X, SI S J, HE K Y, et al. Prediction of Mg alloy corrosion based on machine learning models[J]. Advances in Materials Science and Engineering, 2022, 2022:9597155.
[56] ZHAO X Q, QIN X, XIA S X, et al. Data-driven corrosion assessment of magnesium alloys: a multi-level graph attention network for quantitative hydrogen-evolution prediction[J]. Journal of Magnesium and Alloys, 2026, 18:101964.
[57] BADKOOBEH F, MOSTAAN H, RAFIEI M, et al. Additive manufacturing of biodegradable magnesium-based materials: design strategies, properties, and biomedical applications[J]. Journal of Magnesium and Alloys, 2023, 11(3):801−839.
[58] KIM J, PAN H B. Effects of magnesium alloy corrosion on biological response: perspectives of metal-cell interaction[J]. Progress in Materials Science, 2023, 133:101039.
[59] PENG P, PENG Y, LIU F G, et al. Bayesian optimization and explainable machine learning for high-dimensional multi-objective optimization of biodegradable magnesium alloys[J]. Journal of Materials Science & Technology, 2025, 238:132−145.
[60] RAGURAMAN S, PRIYADARSHINI M S, NGUYEN T, et al. Machine learning-guided accelerated discovery of structure-property correlations in lean magnesium alloys for biomedical applications[J]. Journal of Magnesium and Alloys, 2024, 12(6):2267−2283.
[61] MA S Y, ZHANG D W, ZHANG P L, et al. Rapid prediction of the corrosion behaviour of coated biodegradable magnesium alloys using phase field simulation and machine learning[J]. Computational Materials Science, 2025, 247:113546.
[62] RAHNAMA A, ZEPON G, SRIDHAR S. Machine learning based prediction of metal hydrides for hydrogen storage, part I: prediction of hydrogen weight percent[J]. International Journal of Hydrogen Energy, 2019, 44(14):7337−7344.
[63] SUWARNO S, DICKY G, SUYUTHI A, et al. Machine learning analysis of alloying element effects on hydrogen storage properties of AB2 metal hydrides[J]. International Journal of Hydrogen Energy, 2022, 47(23):11938−11947.
[64] DONG S Y, WANG Y Y, LI J Y, et al. Exploration and design of Mg alloys for hydrogen storage with supervised machine learning[J]. International Journal of Hydrogen Energy, 2023, 48(97):38412−38424.
[65] WANG N G, HUANG Y X, LIU J J, et al. AZ31 magnesium alloy with ultrafine grains as the anode for Mg-air battery[J]. Electrochimica Acta, 2021, 378:138135.
[66] CHEN X R, JIA Y H, SHI Z M, et al. Understanding the discharge behavior of an ultra-high-purity Mg anode for Mg-air primary batteries[J]. Journal of Materials Chemistry A, 2021, 9(37):21387−21401.
[67] XU W, SNIHIROVA D, DENG M, et al. A mathematical model describing the surface evolution of Mg anode during discharge of aqueous Mg-air battery[J]. Journal of Power Sources, 2022, 542:231745.
[68] LIANG H X, YANG K, ZHAO C C, et al. Mitigating the efficiency-voltage trade-off in magnesium air battery via a novel active learning framework[J]. Applied Surface Science, 2024, 657:159806.
[69] LING N, WANG Y Y, SONG S S, et al. Experimentally validated screening strategy for alloys as anode in Mg-air battery with multi-target machine learning predictions[J]. Chemical Engineering Journal, 2024, 496:153824.
[70] WANG L Q, SNIHIROVA D, DENG M, et al. Sustainable aqueous metal-air batteries:an insight into electrolyte system[J]. Energy Storage Materials, 2022, 52:573−597.
[71] GAO J X, LI X T, LIU Q F, et al. A chloride-free electrolyte to suppress the anodic hydrogen evolution corrosion of magnesium anode in aqueous magnesium air batteries[J]. Chemical Engineering Journal, 2023, 464:142655.
[72] WANG L Q, SNIHIROVA D, DENG M, et al. Tailoring electrolyte additives for controlled Mg−Ca anode activity in aqueous Mg-air batteries[J]. Journal of Power Sources, 2020, 460:228106.
[73] SNIHIROVA D, WANG L Q, LAMAKA S V, et al. Synergistic mixture of electrolyte additives: a route to a high-efficiency Mg-air battery[J]. The Journal of Physical Chemistry Letters, 2020, 11(20):8790−8798.
[74] HOCHE D, LAMAKA S V, VAGHEFINAZARI B, et al. Performance boost for primary magnesium cells using iron complexing agents as electrolyte additives[J]. Scientific Reports, 2018, 8:7578.
[75] LI L H, CHEN H, HE E, et al. High-energy-density magnesium-air battery based on dual-layer gel electrolyte[J]. Angewandte Chemie International Edition, 2021, 60:15317−15322.
[76] JIANG P L, LI K, HOU R Q, et al. Boosting discharge performance of primary Mg-air batteries via adopting sodium citrate as electrolyte to suppress self-corrosion of Mg anode during discharge[J]. Chemical Engineering Journal, 2025, 511:162200.
[77] WU Y L, SNIHIROVA D, WURGER T, et al. Machine learning-guided discovery of high-efficiency electrolyte additives for aqueous magnesium-air batteries[J]. Energy Storage Materials, 2025, 76:104120.
[78] DERINGER V L, BARTÓK A P, BERNSTEIN N, et al. Gaussian process regression for materials and molecules[J]. Chemical Reviews, 2021, 121(16):10073−10141.
[79] ZHANG Z Z, GU G X. Physics-informed deep learning for digital materials[J]. Theoretical and Applied Mechanics Letters, 2021, 11(1):100220.

责任编辑:何莉