

中国激光
Chinese Journal of Lasers
ISSN 0258-7025, CN 31-1339/TN

《中国激光》网络首发论文

题目：基于机器学习的增材制造过程优化与新材料研发进展
作者：苏金龙，陈乐群，谭超林，周友翔，翁飞，姚西凌，蒋福林，滕杰
网络首发日期：2022-07-17
引用格式：苏金龙，陈乐群，谭超林，周友翔，翁飞，姚西凌，蒋福林，滕杰. 基于机器学习的增材制造过程优化与新材料研发进展[J/OL]. 中国激光.
<https://kns.cnki.net/kcms/detail/31.1339.TN.20220713.1705.032.html>



网络首发：在编辑部工作流程中，稿件从录用到出版要经历录用定稿、排版定稿、整期汇编定稿等阶段。录用定稿指内容已经确定，且通过同行评议、主编终审同意刊用的稿件。排版定稿指录用定稿按照期刊特定版式（包括网络呈现版式）排版后的稿件，可暂不确定出版年、卷、期和页码。整期汇编定稿指出版年、卷、期、页码均已确定的印刷或数字出版的整期汇编稿件。录用定稿网络首发稿件内容必须符合《出版管理条例》和《期刊出版管理规定》的有关规定；学术研究成果具有创新性、科学性和先进性，符合编辑部对刊文的录用要求，不存在学术不端行为及其他侵权行为；稿件内容应基本符合国家有关书刊编辑、出版的技术标准，正确使用和统一规范语言文字、符号、数字、外文字母、法定计量单位及地图标注等。为确保录用定稿网络首发的严肃性，录用定稿一经发布，不得修改论文题目、作者、机构名称和学术内容，只可基于编辑规范进行少量文字的修改。

出版确认：纸质期刊编辑部通过与《中国学术期刊（光盘版）》电子杂志社有限公司签约，在《中国学术期刊（网络版）》出版传播平台上创办与纸质期刊内容一致的网络版，以单篇或整期出版形式，在印刷出版之前刊发论文的录用定稿、排版定稿、整期汇编定稿。因为《中国学术期刊（网络版）》是国家新闻出版广电总局批准的网络连续型出版物（ISSN 2096-4188，CN 11-6037/Z），所以签约期刊的网络版上网络首发论文视为正式出版。

基于机器学习的增材制造过程优化与新材料研发进展

苏金龙^{1,2}, 陈乐群¹, 谭超林^{1*}, 周友翔¹, 翁飞¹, 姚西凌¹, 蒋福林², 滕杰²

¹ Singapore Institute of Manufacturing Technology, A*STAR, 73 Nanyang Drive, Singapore, 637662;

² 湖南大学 材料科学与工程学院, 湖南 长沙 410082

摘要：增材制造作为一种先进成形方法而备受关注。然而，增材制造过程的开发通常需要进行高昂费时的试错实验，这大大限制了增材制造技术的发展。机器学习作为一种新型人工智能技术，可以加快增材制造各环节的研发过程，因而受到了学术界和工业界的广泛关注。本文综述了基于机器学习的增材制造过程优化和新型金属材料研发进展。首先，对应用于增材制造中的机器学习技术进行了简述。然后，对机器学习在金属材料增材制造过程控制与优化中的应用展开论述，包括成形过程监测与质量控制、工艺窗口预测和沉积路径优化等。接着，介绍了机器学习在基于增材制造研发新型合金材料的研究与应用现状，包括合金成分设计和组织性能预测等。最后，总结并展望了机器学习在该领域未来的发展趋势。

关键词：机器学习；新材料开发；增材制造；计算模拟；材料基因工程

中图分类号 TB31 **文献标志码** A

1 引言

金属材料的增材制造(Additive Manufacturing, AM)过程涉及到多尺度(微观尺度的激光-材料的相互作用和宏观尺度的熔池对流作用)和多物理场(温度场和应力场等)的综合作用，因此是一个较为复杂的成形过程^[1]。在成形过程中有大量的工艺参数(如激光功率、光斑直径、送粉速率、扫描速度等)需要优化，因为这些工艺参数都对合金最终的缺陷、组织和性能产生重要影响。改变工艺参数会影响熔池的能量输入，从而导致成形过程中合金内部热循环、冷却速率、温度梯度以及凝固速率的改变，最终影响材料的微观组织、内部缺陷以及综合性能。在常规研究中，增材制造的合金成分设计和工艺参数优化往往需要进行大量的实验测试和分析。这种试错法需要大量的研发时间和成本，很大程度上限制了增材制造的应用和发展。

近年来，随着人工智能的飞速发展，机器学习作为人工智能的核心技术受到了研究者的广泛关注^[2-3]。机器学习由于在数值分析方面的显著优势已被证明是执行复杂模式识别和回归分析的有效方法，且无需构建和求解底层的物理模型。目前，机器学习技术已在增材制造领域得到了广泛的应用^[4-6]。通过合适的算法，机器学习可以构建出恰当的成分、结构与性能之间的联系，实现增材制造合金成分设计、工艺参数优化以及成形件性能的预测，进而大大提升增材制造新材料和新工艺的研发效率，缩短生产周期，降低成本。因此，本文将对机器学习在增材制造过程优化与新型合金研发方面的研究进展进行了系统分析和论述，并对该领域的发展方向进行了展望。

2 增材制造中的机器学习简述

目前主流的金属增材制造技术主要有选区激光熔化(SLM)、电子束熔融(EBM)和直接能量沉积(DED)。本文也将着重对机器学习在这几种技术中的应用进行回顾^[6]。机器学习是一门交叉学科技术,其核心内容涵盖了计算机科学、概率论、统计学、逼近论等多门学科,是人工智能领域的核心技术,也是工业 4.0 自动化的基础。该技术旨在不通过显著式编程的情况下赋予机器“学习”的能力,并能通过不断的“学习”使机器提高自身性能并做出智能决策。简而言之,就是让机器获得“自我学习”的能力。近年来随着人工智能和计算机科学的发展,机器学习在工业领域的应用得到了飞速的发展^[7-8]。如今,机器学习已经在机器视觉、语音识别、数据挖掘和统计学习等多个领域得到了广泛应用。在拥有一个可靠的训练数据集时,机器学习模型可以从数据集中学习知识,并根据所学习的知识来进行推理。对于增材制造而言,机器学习的应用范围主要囊括了材料成分设计、加工参数优化与工艺窗口预测、过程监控与质量改进以及材料性能预测等^[9-14]。

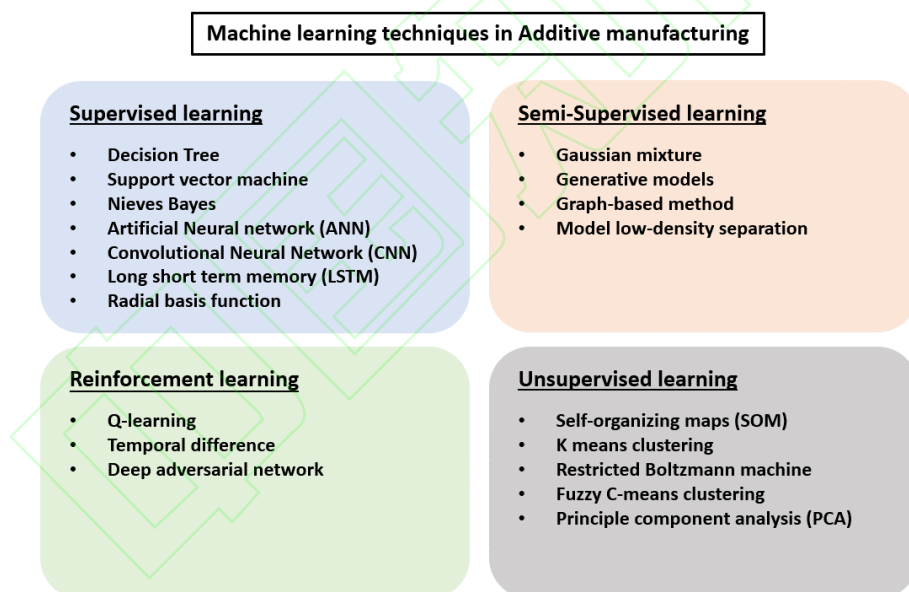


图1 增材制造中常用的机器学习方法

Fig. 1 Machine learning methods commonly used in additive manufacturing

目前在 AM 中常用的机器学习算法如图 1 所示,可分为监督学习(Supervised learning)、无监督学习(Unsupervised learning),半监督学习(Semi-supervised learning),以及强化学习(Reinforcement learning)。其中,监督学习是从已有的数据集中根据已知的输入与输出结果之间的关系,通过训练得到最优的模型,每一个训练数据都有其对应标签。在无监督学习中,所有数据都没有对应标签,机器要从数据集中根据聚类或一定的模型得到数据之间的关系。半监督

学习介于无监督学习和监督学习之间，在训练过程中，通常结合少量标记数据与大量未标记数据，并通过归纳学习(Inductive learning)的方法来推断标记的数据的正确标签。强化学习则是机器与环境不断交互，从而不断强化自己的决策能力的过程，过程需要人为定义行为的收益函数。目前在增材制造中应用较多的主要为监督学习，监督学习又可分为回归(Regression)和分类(Classification)两大类，其中回归主要针对于连续型变量，而分类主要针对离散型变量。回归问题在增材制造中的应用主要包含工艺窗口的预测、工艺参数的优化、合金性能的预测、几何偏差控制和闭环控制等，分类问题的应用主要有缺陷的检测、质量评估以及几何偏差控制等^[9]。非监督学习在 AM 中通常用来进行复杂数据降维(dimensionality reduction)和聚类分析，例如传感器信号的特征抽取(feature extraction)^[15]和缺陷分类^[16]。半监督学习只需要少量标记数据，因此近年来逐渐受到更多关注，例如通过生成对抗网络(Generative adversarial network)归纳 AM 过程中所采集的声音信号，从而预测球化和未熔合孔等缺陷^[17]。目前，强化学习在金属增材制造中的应用主要有基于 Q-learning 算法的质量预测等^[18-19]。

3 机器学习在增材制造过程控制与优化中的应用

3.1 成形过程监测与质量控制

机器学习技术在增材制造的过程控制方面已有较多相关应用，如几何精度控制、熔池特征原位监控、熔池温度分布探测和表面缺陷辨别等^[10, 14, 20, 21]。通过对增材制造过程的原位控制，可以有效提高增材制造零件的最终尺寸精度和性能。

激光增材制造过程伴随着急剧升温和快速冷却，金属构件由于热胀冷缩会产生几何尺寸偏差，因此通常需要热成像来对制造过程进行监控^[22]。而分析图像序列的主要困难是数据量大，由于结构复杂、维数高，许多传统统计方法无法处理。基于此，Francis 等^[10]开发了一种新的深度学习方法，通过考虑局部热传递进行逐点畸变预测，准确预测了增材制造过程中公差范围内的畸变。借助深度学习的可扩展性，提出了基于云的计算框架，利用增材制造产生的大量工艺特性数据流，为加速增材制造零件的制备提供了一条有效途径。通过更高的预测精度，可以为增材制造制定更有效的尺寸补偿方案。随着尺寸补偿方案的发展，增材制造产品整体的几何精度将持续升高。

由于 SLM 中形成的最重要的缺陷通常是在熔池形成时产生，因此开发能够原位监控熔池特征的方法是极具应用前景的。Scime 等^[14]使用机器学习识别了 SLM 增材制造过程中缺陷形成的原位熔池特征，利用计算机视觉技术构造了熔池形态的尺度不变性描述，并利用无监督机器学习来区分熔池形态。通过观察多种工艺参数下的熔池识别出原位特征，从而实现缺陷的原位

观测。类似的，Zhu 等^[23]提出了基于物理信息的神经网络 (Physics-informed neural network – PINN) 框架 (图 2a 所示)，将 DED 过程中收集的原始数据与物理原理(例如动量质量守恒等)相结合，能准确预测熔池温度和动态(图 2b)。

探明增材制造过程中的熔池温度分布和热历史对于估测增材制造金属零件的微观结构、孔隙率和力学性能至关重要^[24]。目前已有大量的分析和数值模拟方法用于预测熔池温度，然而这些方法的准确性还存在不足^[25-27]。为了解决这一问题，Zhang 等^[20]提出了一种通过机器学习数据驱动预测模型来预测 DED 过程中的熔池温度的方法。文章分别基于极端梯度提升(XGBoost)和长短期记忆(LSTM)建立了两种机器学习预测模型，结果表明 XGBoost 比 LSTM 在计算效率上更高，而 LSTM 实现了对熔池温度更高的预测精度。Ren 等^[28]提出了一个用于检测构件的热历史分布的物理基机器学习数值模型，该模型是一种递归神经网络和深度神经网络(RNN-DNN)的组合模型。通过将一个热力场数值模型得到的数据用于对该模型的训练，实现了对任意几何形状在多种扫描策略下的热力场的准确预测。通过比较 RNN-DNN 预测结果与数值模型的结果，表明其匹配度达到 95% 以上，印证了该机器学习方法对于热历史分布预测的有效性。

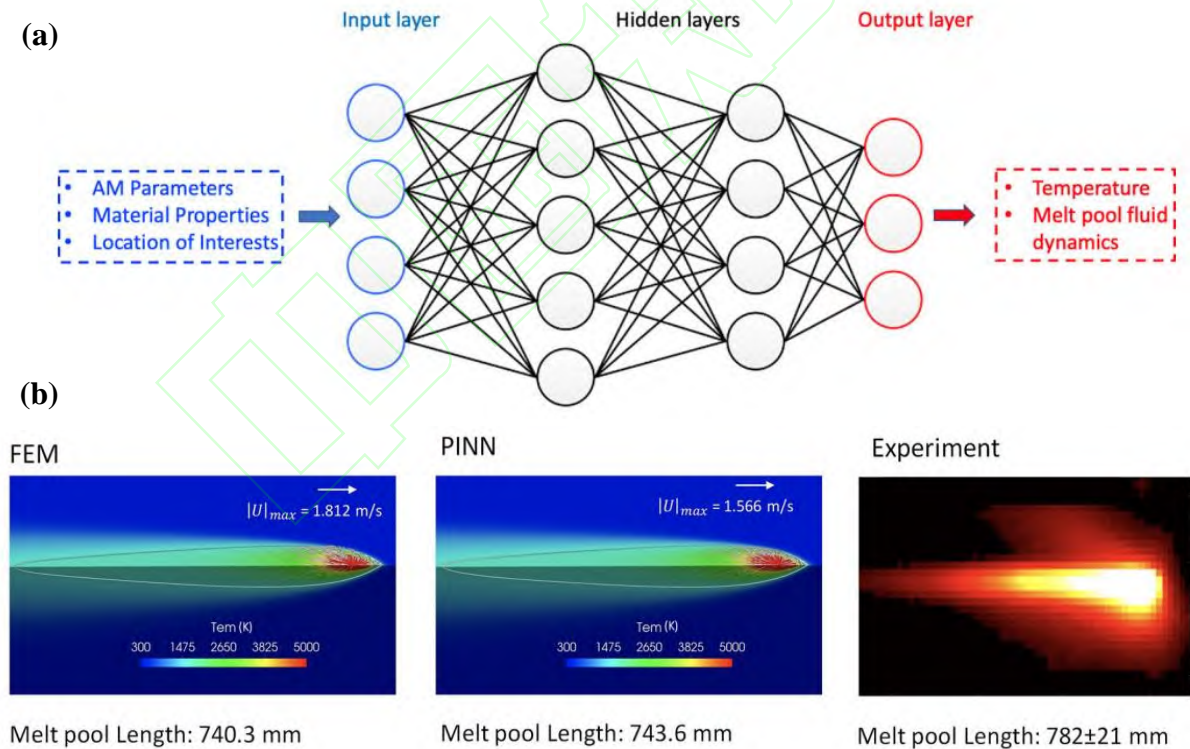


图2 (a) 基于物理信息的神经网络预测熔池温度和动态的框架(Physics-informed neural network – PINN); (b) 温度和熔池预测结果的比较：有限元，PINN和实验^[23]

Fig. 2 (a) A framework for prediction of molten pool temperature and dynamics by neural networks based on physical information (Physics informed neural network – PINN); (b) Comparison of temperature and molten pool prediction results: finite element, PINN, and experimental^[23]

此外，机器学习也可以用于增材制造过程中表面缺陷的原位识别，尤其是对于 DED 技术而言，原位识别缺陷有助于在加工过程中来对缺陷进行修复，从而实现产品质量的控制。如图 3 所示，Chen 等^[29]基于机器学习开发出了一种原位点云处理的方法，可以原位监测出 DED 增材制造过程中表面缺陷的形成。该机器学习模型结合了聚类和多种分类以实现缺陷的识别，并通过多组实验来对该模型进行了训练。结果表明 K-近邻模型精度最优，对缺陷的识别精度高达 93.15%。原位识别出缺陷后，可以设置特定的激光路径对缺陷进行修复，从而大大提升 DED 金属零件的可成形性。

AI-assisted rapid surface defect identification

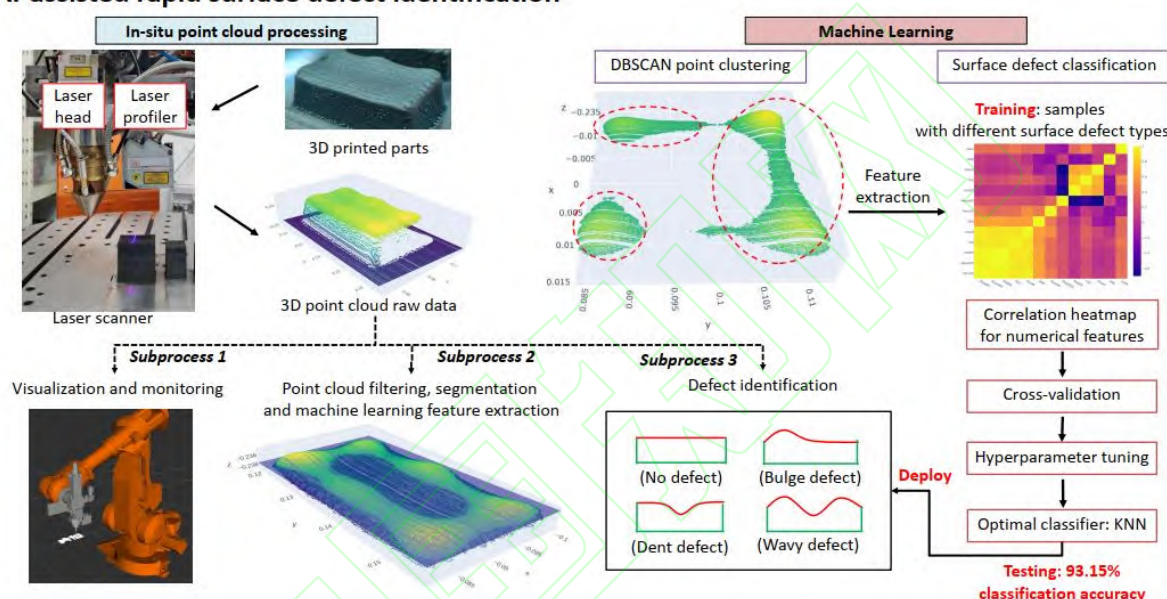


图3 通过原位点云处理和机器学习方法监测DED增材制造过程中表面缺陷的形成^[29]

Fig. 3 Monitoring the formation of surface defects during DED by in situ cloud processing and ML method^[29]

3.2 工艺窗口预测

由于激光增材制造过程涉及到复杂的物理和化学反应，并且不同金属和合金的组织性能的关联不尽相同，为了获取优化的工艺参数通常需要进行大量的试错实验^[30]。尽管目前已有一些优化激光增材制造工艺参数的方法，如激光能量密度经验估计、熔池结构分析和高保真计算建模等^[31-33]。然而，当一种新的合金材料被设计或用于增材制造技术时，工艺参数的优化过程仍然存在较大的问题和挑战。更重要的是，这些工艺优化方法往往只能提供非常有限的一组用于制造高致密度合金的特定工艺参数，而不是探索出获得高致密度合金的整个工艺窗口，这不利于发掘给定合金更优性能的潜力。大量研究表明通过机器学习算法可以有效实现增材制造工艺参数的优化设计以及工艺窗口的预测。此外，机器学习算法由于不需要进行昂贵的试错实验和大量的高保真仿真模型计算，且预测精度较高，近年来受到了研究者的广泛关注。

Chen 等^[34]提出一种预测 SLM 过程中的轨迹缺陷和打印性能的监督机器学习方法，该方法的示意图如图 4 所示。其主要部分可分为增材制造过程、数据提取过程和机械学习过程。在对实验结果进行提取和计算后，利用数据集对机器学习模型进行训练。训练后的模型可以检测缺陷轨迹并预测增材制造质量，从而指导增材制造工艺优化。实验结果的验证表明，该基于反向传播的神经网络的模型成功地用于预测 TiB_2 增强 AlSi10Mg 复合材料的工艺窗口，包括激光功率和扫描速度。

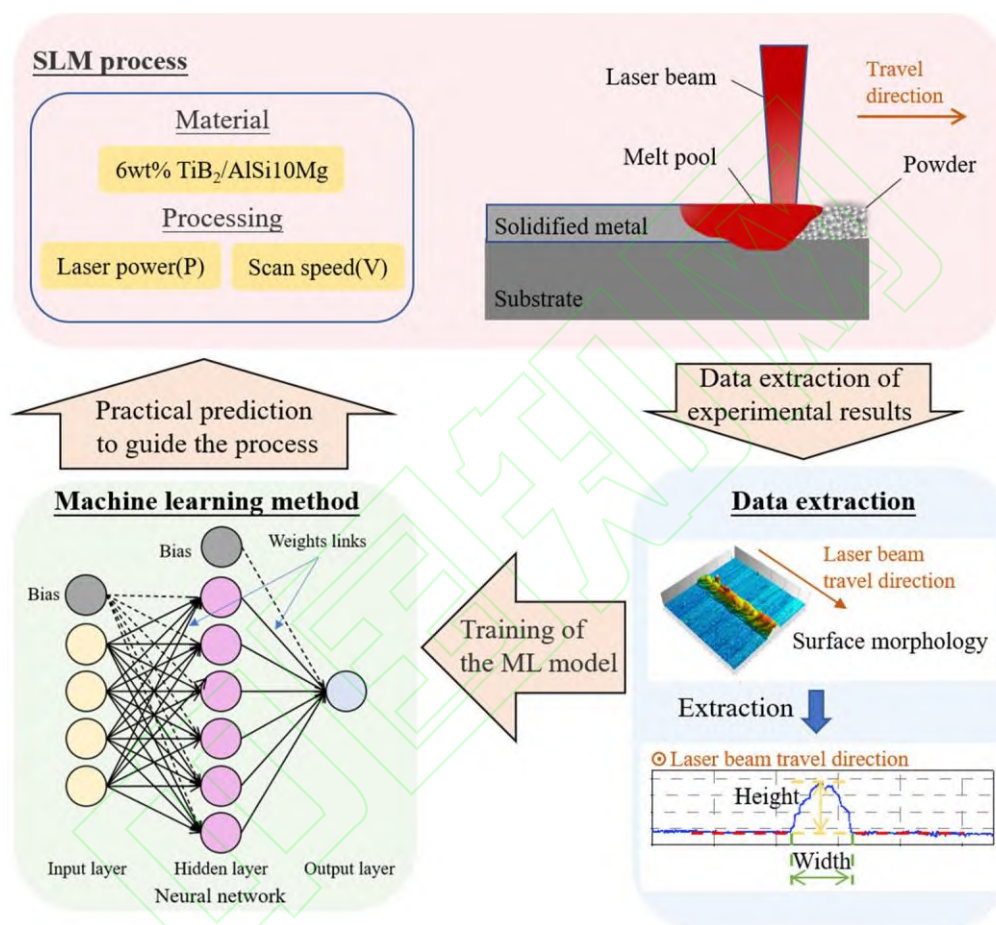


图4 监督机器学习预测增材制造工艺窗口的过程^[34]

Fig. 4 Prediction of the processing window of additive manufacturing by supervised ML^[34]

Wang 等^[35]通过前馈神经网络与反向传播算法的人工神经网络(ANN)建立了选区激光烧结(SLS)工艺参数与材料密度的关联，并定量分析了工艺参数对密度的影响。研究表明，神经网络方法可以有效用于定量的预测材料的最终性能。在一定参数范围内，材料的密度随着激光功率和成形温度的增大而升高，而随着层厚、扫描速度和扫描间距的增大而降低。此外，基于高斯过程的代理模型和少量的实验数据，Tapia 等^[36]建立了 316L 不锈钢 SLM 的工艺窗口预测方法。在预测的工艺窗口下，激光与粉末界面处的熔池表现出理想的热传导模式。通过多种标

准的印证，结果表明基于高斯过程的代理模型可以有效实现工艺窗口的准确预测和增材制造的工艺规划。在另一研究中，Tapia 等^[13]建立了用于学习和预测 SLM 金属构件的孔隙度的基于高斯过程的预测模型。该研究首先建立了空间高斯过程的回归模型，将金属构件的孔隙度作为 SLM 工艺参数的函数进行建模，然后使用贝叶斯推理估计了统计模型的参数，并使用 Kriging 法预测了金属构件在任何给定工艺参数下的孔隙度，预测结果如图 5 所示。17-4PH 钢在 ProX 100 SLM 系统上的测试表明，该类机器学习算法可以准确预测扫描速度和激光功率对金属构件孔隙度的影响，从而实现 SLM 过程中的工艺优化设计。最终，实现了寻找高致密度参数组合的目标：P=50 W 和 v=275 mm/s。

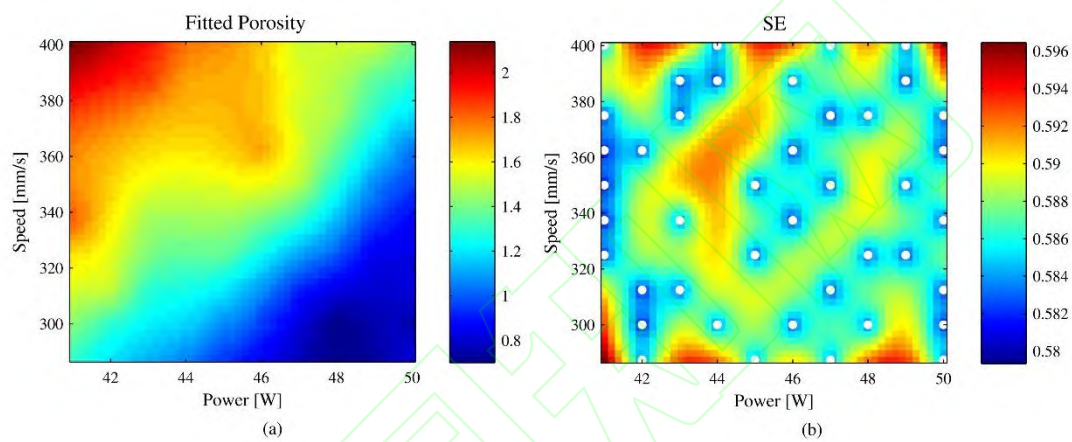


图5 (a)预测孔隙度与激光加工参数的关系；(b)预测值的标准误差^[13]

Fig. 5 (a) Prediction of porosity versus laser machining parameters; (b) Standard error of the predicted value^[13]

Liu 等^[37]通过高斯过程回归模型(GPR)构建了 SLM 过程中的激光功率和扫描速度对 AlSi10Mg 合金的致密度的影响，高斯过程回归模型的可视化结果如图 6 所示。与之前的研究相比，该模型实现了更大范围的工艺窗口预测，获得了多种制备高致密度 AlSi10Mg 的工艺参数。在优化的工艺参数下，AlSi10Mg 的致密度均大于 99%。该研究还发现，AlSi10Mg 的力学性能主要由激光成形过程中的能量密度决定，在相同能量密度下，不同的激光功率和扫描速度则对合金力学性能的影响不大。类似的，He 等^[38]通过高斯过程回归模型实现了 SLM 制备 AlSi10Mg+2 vol% TiCN 复合材料的工艺窗口的预测，发现 AlSi10Mg+2 vol% TiCN 复合材料的工艺窗口明显比 AlSi10Mg 合金窄的多。在优化的工艺窗口内，在恒定能量密度为 50 J/mm³ 的情况下，通过提高激光功率或扫描速度可以增大 Si 共晶胞的尺寸，从而实现高致密度 AlSi10Mg+2 vol% TiCN 复合材料拉伸性能的有效调控。

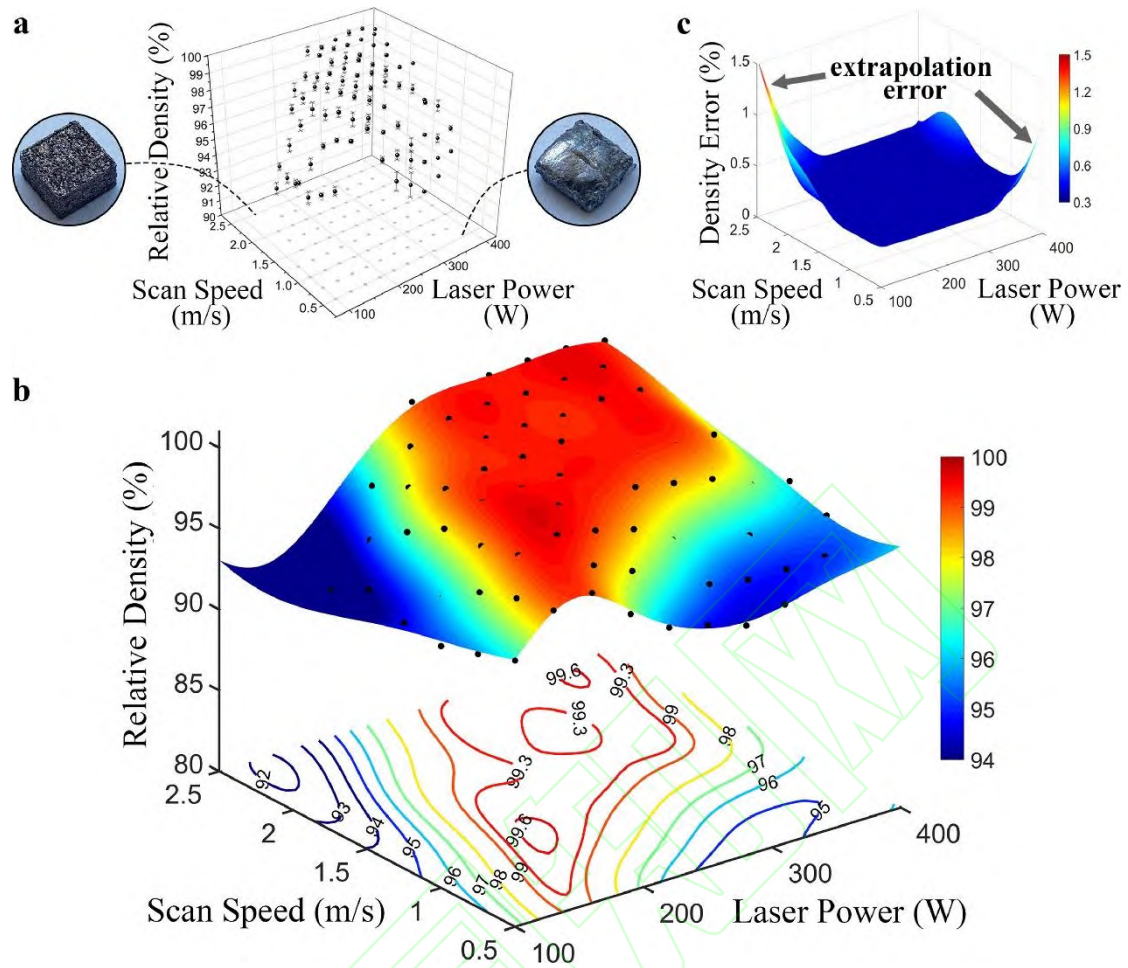


图6 高斯过程回归模型的可视化结果^[37]

Fig. 6 Visualisation results of Gaussian process regression model^[37]

3.3 沉积路径优化

激光增材制造过程中，热累积会导致力学性能和沉积高度的不均匀，不利于制造过程的顺利进行。尤其是对于 DED 技术，过高的激光功率容易导致在合金表面形成热累积，而不是将热能耗散到基板和环境中^[39]。在多层沉积过程中，合金内部的热累积会降低凝固速率，从而改变沉积液滴的形貌以及局部的沉积高度，最终对增材制造过程以及最终的零件质量产生重要影响。因此，合理的沉积路径规划对于改善合金热累积、消除残余应力和提高沉积过程的稳定性是极其关键的^[40-41]。Ren 等^[21]通过整合有限元模拟和机器学习提出了一种用于激光增材制造矩形零件的沉积路径规划的方法，大幅度地减少了沉积过程中的局部热积累，其具体优化方法如图 7 所示。该方法基于温度模式递归神经网络模型预测每一层沉积过程后的温度场分布，从而优选出最佳的成形路径。该方法显著提高了激光沉积路径规划的规划效率，其有效性通过检测沉积的立方体样品的二维平面度得以验证。

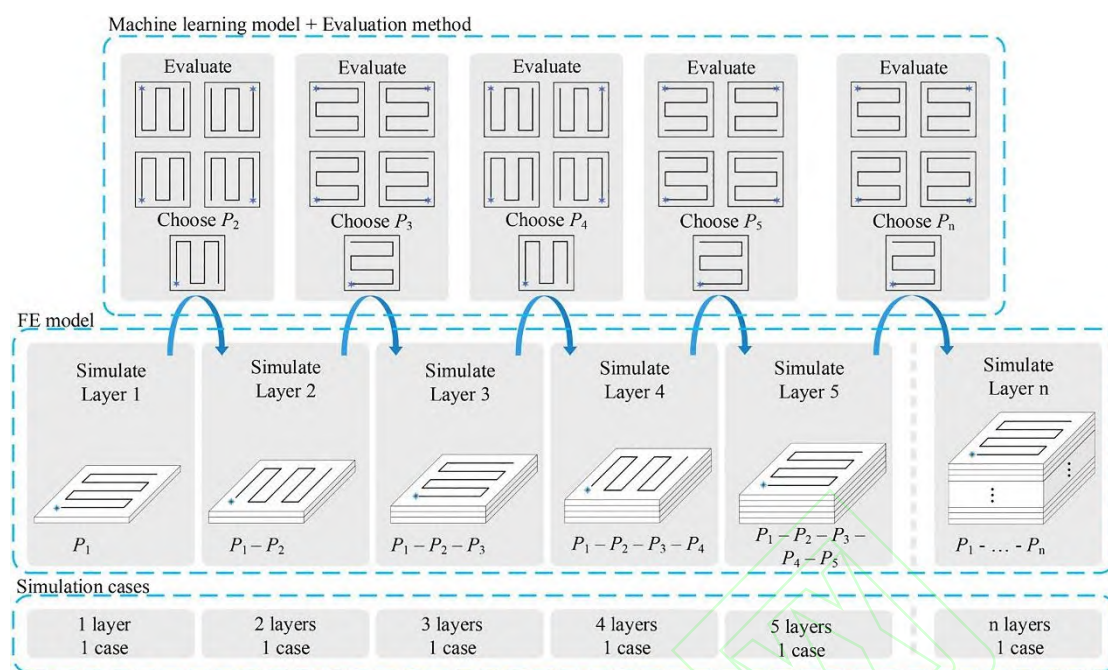


图7 基于机器学习的DED沉积路径的优化方法^[21]

Fig. 7 Optimization processes of DED deposition toolpath assisted by ML^[21]

4 机器学习在新材料研发中的应用

4.1 合金成分的设计

研究表明，通过机器学习可以大幅提高合金材料的设计及筛选效率^[42-45]。因为恰当的机器学习模型可以为合金成分的优化设计提供指导^[46]。目前，机器学习已被广泛用于设计具有多种特殊性能的合金以满足不同的应用需求。例如，机器学习用于设计具有极低弹性模量的 β 钛合金成分以满足人体植入应用，并且设计出来的合金通过实验验证发现具有较低的弹性模量^[47]。类似的，Lee 等^[48]设计了一个基于机器学习的合金设计平台，该平台可对合金进行正向和反向预测。通过在机器学习平台上使用 16 种描述符对钢进行综合分析，准确预测了 5473 种热机械控制加工(TMCP)钢的屈服强度和抗拉强度。集成的机器学习平台是基于正则化的线性回归、集成机器学习和非线性机器学习的算法。通过该优化工艺很好地控制了 C、Mn、Nb 和 Si 的含量，且结果表明固溶体中这些关键合金元素的含量对强度的提升具有显著作用，并对 TMCP 钢的应用起到了推进作用。此外，近期也有结合数据挖掘和机器学习方法探索高强高韧钛合金成分的方法报道。Zou 等^[44]通过数据挖掘方法揭示了原子和电子层面的成分-结构-性能关系，从而解决了先进高强高韧钛合金设计的关键问题。研究结果表明，数据挖掘和机器学习的集成不仅可以对已有现象作合理的解释，也可以对新的假设进行验证，该方法在推进先进高强高韧钛合金的设计方面是一种有效和更具成本效益的方式。Jiang 等^[49]通过一种机器学习设计系统(机器学习 DS)策略，逆向研发出了 3 种高强高韧铝合金，其抗拉强度达到 700-750 MPa，并且延伸率达到

8%-10%。如图 8 所示，与目前最先进的高强韧 7136 铝合金相比，该合金的抗拉强度提高了近 100 MPa，实现了显著的强韧化效果。

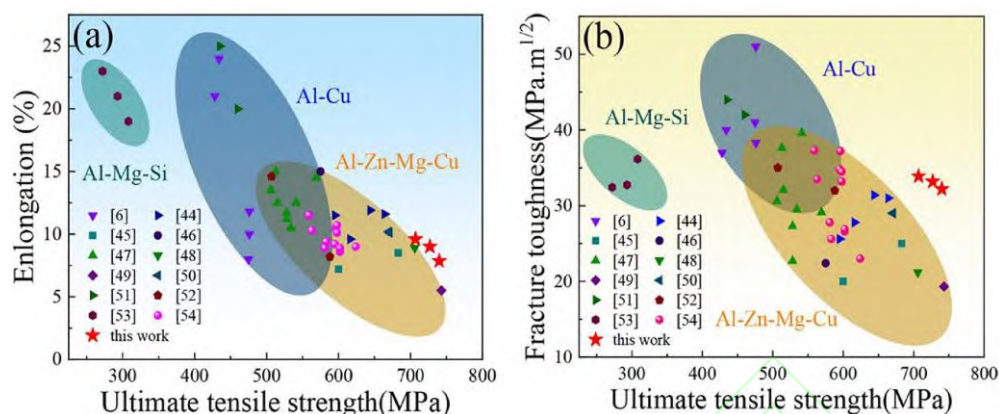


图8 机器学习辅助设计高强高韧铝合金^[49]

Fig. 8 ML assisted design of high strength and tough aluminum alloys^[49]

值得注意的是，由于激光成形过程中的凝固开裂以及固态相变等过程，在成形过程中避免裂纹的形成是增材制造面临的一大挑战，因此进行合金成分设计时应充分考虑合金的增材制造可成形性。Dovggy 等^[50]通过结合 Scheil–Gulliver 凝固模拟与机器学习分析成功设计了一款用于增材制造过程中可避免凝固裂纹的 FeCrAl 合金(Fe-20Cr-7Al-4Mo-3Ni)。实验表明，该合金在打印态时为一种单相合金，织构强度很低且基本不存在化学成分偏析。此外，在打印过程中，合金内部既不存在凝固裂纹，也不存在液化裂纹，从而证明了该合金成分设计方法的有效性。Sabzi 等^[51]基于热力学计算和遗传算法提出了一种设计具有低凝固裂纹敏感性的奥氏体不锈钢合金成分的计算方法。通过该方法对 316L 合金成分进行了微调，提出了一种新型的合金成分，有效降低了 316L 合金凝固裂纹敏感性，提高了增材制造过程的可成形性和材料强度。

4.2 合金组织的预测

探明激光成形过程中合金内部微观组织的演变对于评估和调控合金的力学性能具有重要影响。由于激光增材制造过程中材料内部的温度梯度和冷却速率的复杂变化可高达一个数量级，因此通过传统方法来对增材制造合金的组织进行预测较为困难^[52]。近期，有研究表明机器学习可以实现增材制造合金组织的预测。Kats 等^[53]提出了一种用于机器学习预测 DED 沉积材料的晶粒结构特性(包含局部平均晶粒尺寸和平均晶粒长径比)的方法。通过使用元胞自动机有限体积法生成了 DED 增材制造 Inconel 718 合金模型的训练数据库，其中元胞自动机用于对晶粒结构进行建模，有限体积法用于模拟传热，最终建立了神经网络模型来识别局部热特征与其对应的晶粒结构特征之间的关性。尽管该方法的输入参数是局部热特征而不是激光加工参数，但它可以作为三维元胞自动机的补充工具，以实现在增材制造处理过程中规模实时晶粒结构的预测。

此外, Li 等^[54]提出了一种用于预测 DED 制造过程中 Ti-6Al-4V 合金晶粒竞争性生长行为的人工神经网络方法。在该论文中, 人工神经网络方法被用来研究晶界倾角与热梯度、晶体取向和 Marangoni 效应之间的关系, 并通过一系列 DED 增材制造 Ti-6Al-4V 合金的实验数据作为训练库对模型进行训练。与传统的微观组织模拟方法相比, 该方法在竞争性晶粒生长行为的预测方面具有更高的预测精度。

4.3 合金性能的预测

目前, 增材制造合金成分的设计和性能优化的主要依赖于传统的列举和试错法, 存在实验周期长、成本高的缺点。将机器学习应用在增材制造合金的性能(如表面粗糙度、致密度、疲劳性能、拉伸性能等)的预测, 从大量实验数据中提取出工艺参数与合金性能之间的隐藏联系, 获得合理的预测模型, 可以有效缩短特定合金工艺参数的开发周期, 并能节约研发成本。

Rankouhi 等^[55]通过使用基于多维高斯过程的机器学习算法预测了金属构件在特定激光功率、扫描速度和扫描间距时 316L-Cu 复合材料的孔隙度和表面粗糙度。文章所构建的多维高斯过程方法是通过 316L 和 Cu 的实验数据来预测所研究 316L-Cu 复合材料的性能, 训练数据是通过少量的高通量实验得到的材料的密度和表面粗糙度。成功实现了 316L-Cu 复合材料的密度和表面粗糙度的预测。此外, 316L-Cu 复合材料梯度区间内的优化工艺参数与梯度成分呈非线性函数关系, 其中激光功率和扫描速度是影响 316L-Cu 复合材料密度和表面粗糙度的重要参数。

此外, 机器学习在复杂力学方面的预测中非常流行^[56]。在以往的实验研究中, 对增材制造金属材料疲劳性能的预测通常需要耗时且昂贵的大量测试来完成, 而现有研究表明通过机器学习的辅助则可以有效缩短该周期^[57]。在疲劳损伤和力学性能的预测方面, 机器学习常用到的方法有人工神经网络(ANN)、随机森林(RFs)和支持向量机(SVM)。Zhan 等^[58]分别用三种机器学习方法分别开发了基于连续介质损伤力学(CDM)的增材制造 316L 不锈钢疲劳行为的数据分析平台。通过机器学习建立了用于预测 316L 不锈钢疲劳性能的算法, 并成功探明了工艺参数如激光功率、扫描速率和粉末层厚度对金属构件疲劳性能的影响规律, 有效避免了大量耗时的疲劳测试。通过将预测值与文献中的实验数据对比, 证实了该模型有着较高的预测精度。研究结果还表明, RF 模型相比 ANN 和 SVM 模型预测精度更高, 且训练数据的数量对预测的精度有重要影响。此外, 模型结果发现 316L 的疲劳性能对最大应力和粉末层厚度最为敏感, 因此, 通过降低粉末层厚度可以有效提高 316L 的疲劳性能。

增材制造合金的微观组织与拉伸性能的关系是极其复杂的, 建立通过微观结构预测金属材料力学性能的模型具有极大的挑战性。因此, 对于机器学习而言, 首先需要合理的方法来定量表征合金的微观组织。基于此, Kusano 等^[59]通过基于随机森林算法的机器学习从扫描电子

图像中定量提取出了 Ti-6Al-4V 合金微观结构的特征。通过多元线性回归分析，利用微观结构特征以及 CT 扫描重构的缺陷特征，建立了热处理态 Ti-6Al-4V 合金拉伸性能的预测模型。分析表明，合金的屈服强度和抗拉强度均与 α 晶粒尺寸倒数的平方根呈线性关系，多元线性回归模型预测的屈服强度和抗拉强度有极好的精度，误差小于 2 %。然而，预测的断裂伸长率和弹性模量则与实测值有较大偏差，这是因为还有一些特征参数如位错分布等没有考虑到预测的模型中。

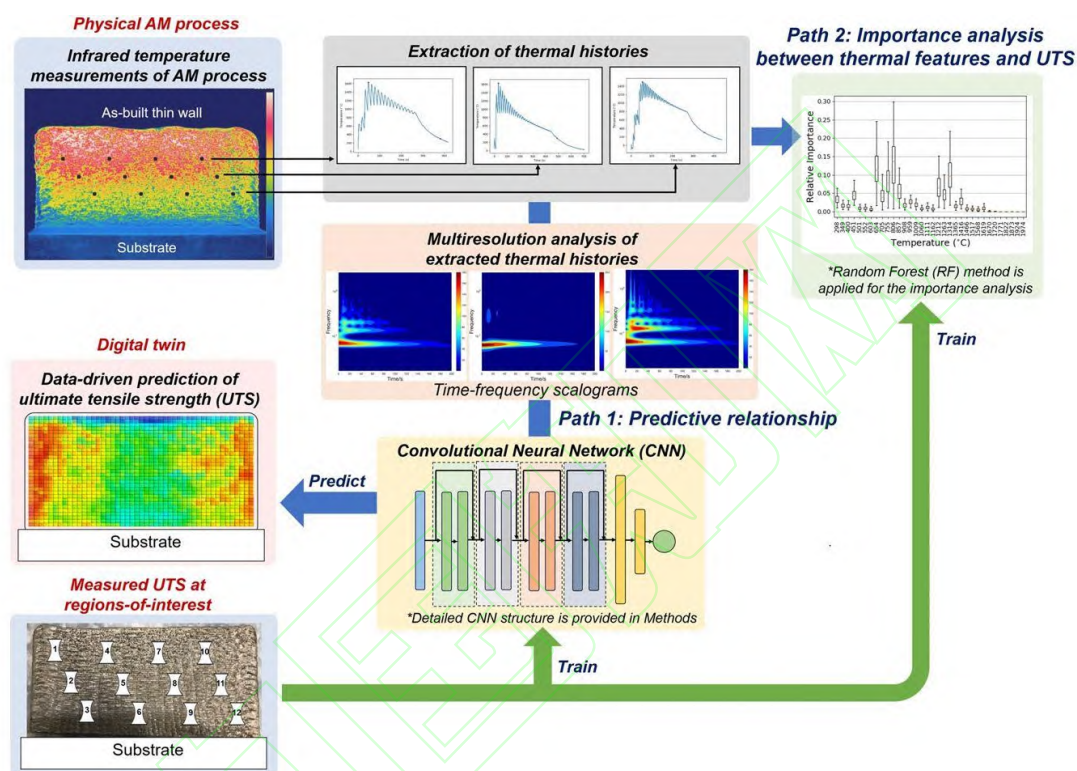


图 9 力学数据驱动成形零件力学性能预测的框架示意图^[60]

Fig. 9 A schematic of the proposed mechanistic data-driven framework for mechanical property prediction^[60]

Xie 等^[60]开发了一种集成小波变换和卷积神经网络的力学数据驱动框架，其示意图如图 9 所示。该框架采用成形零件局部的热历史预测零件局部力学性能在时间和空间尺度上的分布。该框架主要分为两条路径，其一是将成形过程中的局部热历史和力学性能联系起来，另一条是对热特征和抗拉强度的重要性进行分析，从而将热历史、热特征分布和局部区域的抗拉强度联系起来。与其他机器学习方法相比，该框架仅需要少量的实验数据就可以实现较大精度的预测。

5 总结与展望

近年来，随着人工智能和计算机科学的发展，机器学习技术在增材制造领域取得了较为广泛的应用。在金属材料的增材制造领域，如图 10 所示，机器学习的应用范围主要包括制造过程

的控制、工艺窗口的预测、合金成分的设计和合金组织性能的预测等。机器学习技术与增材制造相结合，避免了大量的试错成本，大大提升了增材制造的成形质量和效率，加快了增材制造专用新型金属材料的研发进程。从而，有望进一步拓展先进增材制造技术的应用领域。

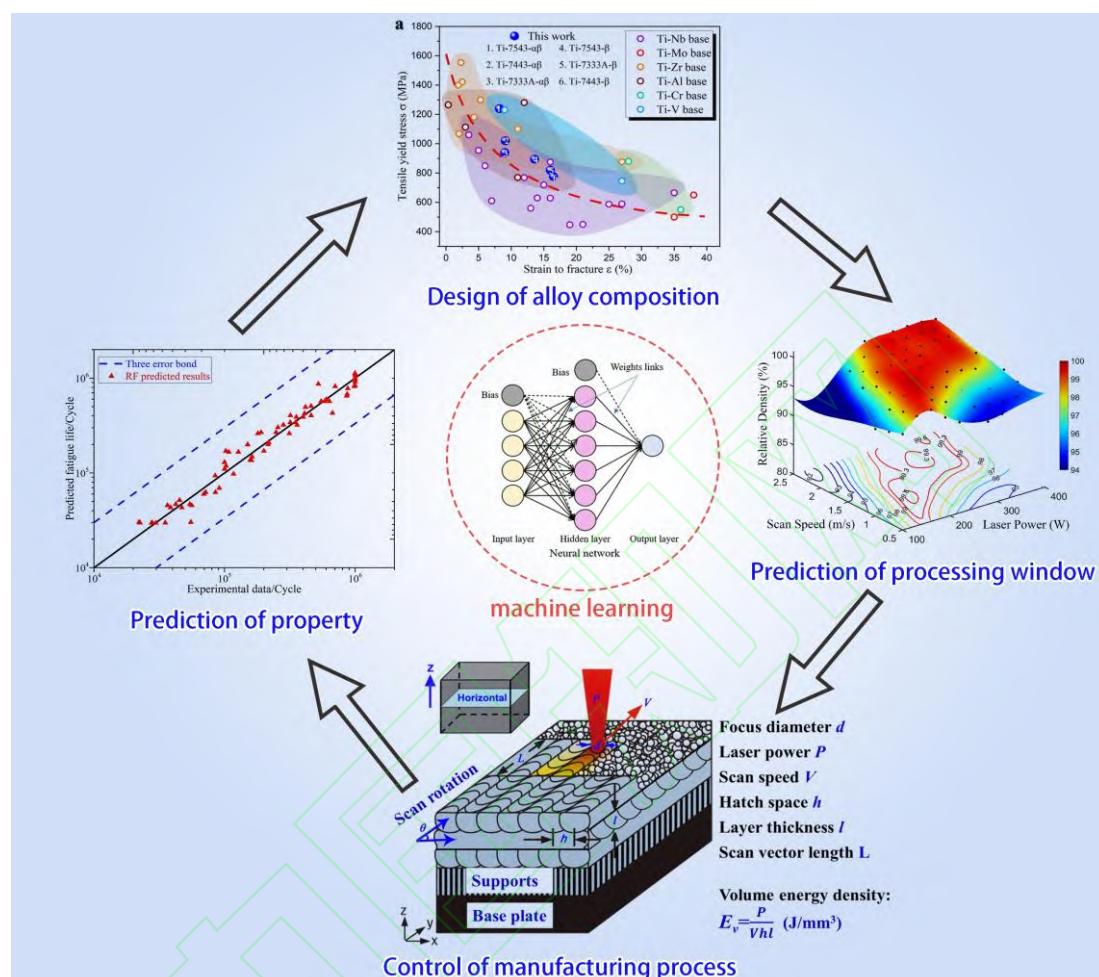


图 10 机器学习在增材制造金属材料成分设计、过程优化和性能控制中的应用[37, 44, 58, 61]

Fig. 10 Machine learning assisted composition design, process optimization and performance control in additive manufacturing metallic materials

在过程控制与优化中的应用方面，机器学习技术可以用于增材制造过程的控制、工艺窗口的预测和沉积路径的优化等，通过结合适当的机器学习策略可以揭示增材制造过程工艺参数与零件精度和致密度的联系，从而大幅缩短增材制造工艺开发时间。然而，目前已有的基于机器学习的研究通常只是针对于增材制造过程的某一环节，极大限制了机器学习技术在增材制造领域的应用推广。通过开发对整个增材制造全过程具有普适性应用价值的机器算法，实现增材制造成型参数-组织-性能之间的有效关联，将会大大提高增材制造过程控制与优化的效率、推动机器学习技术在增材制造过程控制与优化领域的应用。这也是今后机器学习辅助增材制造过程控制与优化的重点研究方向。

在增材制造金属材料开发方面，机器学习是一种理想的解决方案，已有大量研究表明通过

机器学习方法可以有效避免传统试错法带来的高额成本。然而，机器学习需要大量的数据库作为模型的训练支撑，因此数据库的建设和发展是机器学习的前提。长期以来，金属材料增材制造领域已经有大量的文献发表，积累了海量的实验数据，为机器学习技术的发展奠定了扎实的基础。随着材料实验数据挖掘技术的发展，丰富的数据库将有利于促进增材制造领域新型金属材料的开发。

参考文献

- [1] Song J F, Song Y N, Wang W W, et al. Prediction and Control on the Surface Roughness of Metal Powder using Selective Laser Melting[J]. Chinese Journal of Lasers, 2022, 49(2): 0202008.
宋剑锋, 宋有年, 王文武, 等. 金属粉末选区激光熔化成形表面粗糙度预测及控制方法研究[J]. 中国激光, 2022, 49(2): 0202008
- [2] Ramprasad R, Batra R, Pilania G, et al. Machine learning in materials informatics: Recent applications and prospects[J]. npj Computational Materials, 2017, 3(1):1-13.
- [3] 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(1): 1-36.
- [4] Johnson N S, Vulimiri P S, To A C, et al. Invited review: Machine learning for materials developments in metals additive manufacturing[J]. Additive Manufacturing, 2020, 36: 101641.
- [5] Qi X, Chen G, Li Y, et al. Applying Neural-Network-Based Machine Learning to Additive Manufacturing: Current Applications, Challenges, and Future Perspectives[J]. Engineering, 2019, 5(4): 721-729.
- [6] Wang C, Tan X P, Tor S B, et al. Machine learning in additive manufacturing: State-of-the-art and perspectives[J]. Additive Manufacturing, 2020, 36: 101538.
- [7] Wang Q, Zeng W D, Xia Z P, et al. Recognition of Food-Borne Pathogenic Bacteria by Raman Spectroscopy Based on Random Forest Algorithm[J]. Chinese Journal of Lasers, 2021, 48(3): 0311002.
王其, 曾万聃, 夏志平, 等. 基于随机森林算法的食源性致病菌拉曼光谱识别[J]. 中国激光, 2021, 48(3): 0311002
- [8] Liu L X, He D, Li M Z, et al. Identification of Xinjiang Jujube Varieties Based on Hyperspectral Technique and Machine Learning[J]. Chinese Journal of Lasers, 2020, 47(11): 1111002.
刘立新, 何迪, 李梦珠, 等. 基于高光谱技术与机器学习的新疆红枣品种鉴别[J]. 中国激光, 2020, 47(11): 1111002
- [9] Meng L, Mcwilliams B, Jarosinski W, et al. Machine Learning in Additive Manufacturing: A Review[J]. JOM, 2020, 72(6): 2363-2377.
- [10] Francis J, Bian L. Deep Learning for Distortion Prediction in Laser-Based Additive Manufacturing using Big Data[J]. Manufacturing Letters, 2019, 20: 10-14.
- [11] Chan S L, Lu Y, Wang Y. Data-driven cost estimation for additive manufacturing in cybermanufacturing[J]. Journal of Manufacturing Systems, 2018, 46: 115-126.
- [12] Yao X, Moon S K, Bi G. A hybrid machine learning approach for additive manufacturing design feature recommendation[J]. Rapid Prototyping Journal, 2017, 23(6): 983-997.
- [13] Tapia G, Elwany A H, Sang H. Prediction of porosity in metal-based additive manufacturing using spatial Gaussian process models[J]. Additive Manufacturing, 2016, 12: 282-290.
- [14] Scime L, Beuth J. Using machine learning to identify in-situ melt pool signatures indicative of flaw formation in a laser powder bed fusion additive manufacturing process[J]. Additive Manufacturing, 2019,

25: 151-165.

- [15] Shevchik S A, Masinelli G, Kenel C, et al. Deep Learning for In Situ and Real-Time Quality Monitoring in Additive Manufacturing Using Acoustic Emission[J]. IEEE Transactions on Industrial Informatics, 2019, 15(9): 5194-5203.
- [16] Grasso M, Laguzza V, Semeraro Q, et al. In-Process Monitoring of Selective Laser Melting: Spatial Detection of Defects Via Image Data Analysis[J]. Journal of Manufacturing Science and Engineering, 2016, 139: 051001.
- [17] Pandiyan V, Drissi-Daoudi R, Shevchik S, et al. Semi-supervised Monitoring of Laser powder bed fusion process based on acoustic emissions[J]. Virtual and Physical Prototyping, 2021, 16(4): 1-17.
- [18] Wasmer K, Le-Quang T, Meylan B, et al. In Situ Quality Monitoring in AM Using Acoustic Emission: A Reinforcement Learning Approach[J]. Journal of Materials Engineering and Performance, 2019, 28: 666–672.
- [19] Goh G D, Sing S L, Yeong W Y. A review on machine learning in 3D printing: applications, potential, and challenges[J]. Artificial Intelligence Review, 2021, 54: 63-94.
- [20] Zhang Z, Liu Z, Wu D. Prediction of melt pool temperature in directed energy deposition using machine learning[J]. Additive Manufacturing, 2021, 37: 101692.
- [21] Ren K, Chew Y, Liu N, et al. Integrated numerical modelling and deep learning for multi-layer cube deposition planning in laser aided additive manufacturing[J]. Virtual and Physical Prototyping, 2021, 16(3), 318–332.
- [22] Liu H, Sparks T, Liou F, et al. Residual stress and deformation modelling for metal additive manufacturing processes[C]//Proceedings of the World Congress on Mechanical, Chemical, and Material Engineering, July 20-21, 2015, Barcelona, Spain. 2015, 245: 1–9.
- [23] Zhu Q, Liu Z, Yan J. Machine learning for metal additive manufacturing: predicting temperature and melt pool fluid dynamics using physics-informed neural networks[J]. Computational Mechanics, 2021, 67(2): 619–635.
- [24] Shamsaei N, Yadollahi A, Bian L, et al. An overview of Direct Laser Deposition for additive manufacturing; Part II: Mechanical behavior, process parameter optimisation and control[J]. Additive Manufacturing, 2015, 8:12-35.
- [25] Khanzadeh M, Chowdhury S, Tschopp M A, et al. In-situ monitoring of melt pool images for porosity prediction in directed energy deposition processes[J]. IISE Transactions, 2019, 51(5): 437–455.
- [26] Pinkerton A J, Li L. Modelling the geometry of a moving laser melt pool and deposition track via energy and mass balances[J]. Journal of Physics D: Applied Physics, 2004, 37(14): 1885–1895.
- [27] Xiong Y, Hofmeister W H, Cheng Z, et al. In situ thermal imaging and three-dimensional finite element modeling of tungsten carbide-cobalt during laser deposition[J]. Acta Materialia, 2009, 57(18): 5419–5429.
- [28] Ren K, Chew Y, Zhang Y F, et al. Thermal field prediction for laser scanning paths in laser aided additive manufacturing by physics-based machine learning[J]. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 2020, 362: 112734.
- [29] Chen L, Yao X, Xu P, et al. Rapid surface defect identification for additive manufacturing with in-situ point cloud processing and machine learning[J]. Virtual and Physical Prototyping, 2021, 16(1): 50–67.
- [30] Zhang B, Dembinski L, Coddet C, et al. The study of the laser parameters and environment variables effect on mechanical properties of high compact parts elaborated by selective laser melting 316L powder[J]. Materials Science and Engineering A, 2013, 584: 21–31.
- [31] Zavala-Arredondo M, London T, Allen M, et al. Use of power factor and specific point energy as design parameters in laser powder-bed-fusion (L-PBF) of AlSi10Mg alloy[J]. Materials and Design, 2019, 182:

- [32] Kempen K, Thijs L, Van Humbeeck J, et al. Processing AlSi10Mg by selective laser melting: Parameter optimisation and material characterisation[J]. *Materials Science and Technology*, 2015, 31(8): 917–923.
- [33] Khairallah S A, Martin A A, Lee J R I, et al. Controlling interdependent meso-nanosecond dynamics and defect generation in metal 3D printing[J]. *Science*, 2020, 368: 660–665.
- [34] Chen Y, Wang H, Wu Y. Predicting the printability in selective laser melting with a supervised machine learning method[J]. *Materials*, 2020, 13(22): 1–12.
- [35] Wang R J, Li J, Wang F, et al. ANN model for the prediction of density in Selective Laser Sintering[J]. *International Journal of Manufacturing Research*, 2009, 4(3): 362–373.
- [36] Tapia G, Khairallah S, Matthews M, et al. Gaussian process-based surrogate modeling framework for process planning in laser powder-bed fusion additive manufacturing of 316L stainless steel[J]. *International Journal of Advanced Manufacturing Technology*, 2018, 94: 3591–3603.
- [37] Liu Q, Wu H, Paul M J, et al. Machine-learning assisted laser powder bed fusion process optimisation for AlSi10Mg: New microstructure description indices and fracture mechanisms[J]. *Acta Materialia*, 2020, 201: 316–328.
- [38] He P, Liu Q, Kruzic J J, et al. Machine-learning assisted additive manufacturing of a TiCN reinforced AlSi10Mg composite with tailorable mechanical properties[J]. *Materials Letters*, 2021, 307: 1–4.
- [39] DebRoy T, Wei H L, Zuback J S, et al. Additive manufacturing of metallic components - Process, structure and properties[J]. *Progress in Materials Science*, 2018, 92: 112–224.
- [40] Ren K, Chew Y, Zhang Y F, et al. Thermal analyses for optimal scanning pattern evaluation in laser aided additive manufacturing[J]. *Journal of Materials Processing Technology*, 2019, 271: 178–188.
- [41] Ren K, Chew Y, Fuh J Y H., et al. Thermo-mechanical analyses for optimised path planning in laser aided additive manufacturing processes[J]. *Materials and Design*, 2019, 162: 80–93.
- [42] Islam N, Huang W, Zhuang H L. Machine learning for phase selection in multi-principal element alloys[J]. *Computational Materials Science*, 2018, 150: 230–235.
- [43] Wen C, Zhang Y, Wang C, et al. Machine learning assisted design of high entropy alloys with desired property[J]. *Acta Materialia*, 2019, 170: 109–117.
- [44] Zou C, Li J, Wang W Y, et al. Integrating data mining and machine learning to discover high-strength ductile titanium alloys[J]. *Acta Materialia*, 2021, 202: 211–221.
- [45] Xie J X, Su Y J, Xue D Z, et al. Machine Learning for Materials Research and Development[J]. *Acta Metallurgica Sinica*, 2021, 57(11): 1343–1361.
谢建新, 宿彦京, 薛德祯, 等. 机器学习在材料研发中的应用[J]. *金属学报*, 2021, 57(11), 1343–1361.
- [46] Anijdan S H M, Bahrami A, Hosseini H R M, et al. Using genetic algorithm and artificial neural network analyses to design an Al-Si casting alloy of minimum porosity[J]. *Materials and Design*, 2006, 27(7): 605–609.
- [47] Yang F, Li Z, Wang Q, et al. Cluster-formula-embedded machine learning for design of multicomponent β -Ti alloys with low Young's modulus[J]. *npj Computational Materials*, 2020, 101: 1–11.
- [48] Lee J W, Park C, Lee B D, et al. A machine-learning-based alloy design platform that enables both forward and inverse predictions for thermo-mechanically controlled processed (TMCP) steel alloys[J]. *Scientific Reports*, 2021, 11: 1–18.
- [49] Jiang L, Wang C, Fu H, et al. Discovery of aluminum alloys with ultra-strength and high-toughness via a property-oriented design strategy[J]. *Journal of Materials Science and Technology*, 2022, 98: 33–43.
- [50] Dovgvy B, Simonelli M, Pham M S. Alloy design against the solidification cracking in fusion additive manufacturing: an application to a FeCrAl alloy[J]. *Materials Research Letters*, 2021, 9(8): 350–357.

- [51] Sabzi H E, Maeng S, Liang X, et al. Controlling crack formation and porosity in laser powder bed fusion: Alloy design and process optimisation[J]. Additive Manufacturing, 2020, 34: 101360.
- [52] Lian Y, Gan Z, Yu C, et al. A cellular automaton finite volume method for microstructure evolution during additive manufacturing[J]. Materials and Design, 2019, 169: 107672.
- [53] Kats D, Wang Z, Gan Z, et al. A physics-informed machine learning method for predicting grain structure characteristics in directed energy deposition[J]. Computational Materials Science, 2021, 202: 110958.
- [54] Li J, Sage M, Guan X, et al. Machine Learning-Enabled Competitive Grain Growth Behavior Study in Directed Energy Deposition Fabricated Ti6Al4V[J]. JOM, 2020, 72(1): 458–464.
- [55] Rankouhi B, Jahani S, Pfefferkorn F E, et al. Compositional grading of a 316L-Cu multi-material part using machine learning for the determination of selective laser melting process parameters[J]. Additive Manufacturing, 2021, 38: 101836.
- [56] Moghadam P Z, Rogge S M J, Li A, et al. Structure-mechanical stability relations of metal-organic frameworks via machine learning[J]. Matter, 2019, 1: 219–234.
- [57] Zhan Z, Li H. A novel approach based on the elastoplastic fatigue damage and machine learning models for life prediction of aerospace alloy parts fabricated by additive manufacturing[J]. International Journal of Fatigue, 2020, 145: 106089.
- [58] Zhan Z, Li H. Machine learning based fatigue life prediction with effects of additive manufacturing process parameters for printed SS 316L[J]. International Journal of Fatigue, 2020, 142: 105941.
- [59] Kusano M, Miyazaki S, Watanabe M. Tensile properties prediction by multiple linear regression analysis for selective laser melted and post heat-treated Ti-6Al-4V with microstructural quantification[J]. Materials Science and Engineering A, 2020, 787: 139549.
- [60] Xie X, Bennett J, Saha S, et al. Mechanistic data-driven prediction of as-built mechanical properties in metal additive manufacturing[J]. npj Computational Materials, 2021, 7(86): 1-12.
- [61] Tan C, Zhou K, Ma W, et al. Microstructural evolution, nanoprecipitation behavior and mechanical properties of selective laser melted high-performance grade 300 maraging steel[J]. Materials and Design, 2017, 134: 23-34.

Progress in Machine Learning-assisted Process Optimization and Novel Materials Development in Additive Manufacturing

Su Jinlong^{1,2}, Chen Lequn¹, Tan Chaolin^{1*}, Chew Youxiang¹, Weng Fei¹, Yao Xiling¹, Jiang Fulin², Teng Jie²

¹*Singapore Institute of Manufacturing Technology, A*STAR, 73 Nanyang Drive, 637662, Singapore*

²*College of Materials Science and Engineering, Hunan University, Changsha, Hunan 410082, China*

Abstract

Significance: Additive manufacturing (AM), also known as 3D printing, is a disruptive technique and makes good compensation for conventional manufacture methods. AM process 3D parts in a layer-by-layer manner following the designed 3D model and toolpaths. The rapid advancements of AM allows unprecedented design freedom for manufacturing complex, composite and hybrid structures with high precision, which cannot be achieved by traditional fabrication routes. However, the AM process development and optimization usually requires costly and time-consuming trial-and-error experiments, which limits the further application of AM. Machine learning (ML), as a new type of artificial intelligence technology, can speed up the research and development process in many aspects of AM, and has therefore received extensive attention from academia and industry. With the assistance of ML, the process of AM can be expedited and well optimized. Moreover, the relationship between the process parameters and the achievable property of the alloys can be well revealed through ML, which is hardly fulfillable by traditional methods. The ML technique has exhibited promising potentials in accumulating process optimization and novel alloys design for AM recently. Hence, the work reviewed the research progress of the ML assisted AM in the past decade.

Progress: Firstly, the ML technology used in AM is described. In general, ML methods can be divided into supervised learning, unsupervised learning, semi-supervised learning, and reinforcement learning. According to previous studies, there are many applications for each ML method. As a result, the typical applications for each ML method has been introduced (Fig. 1). Second, the application of ML in the control and optimization of the AM metal materials is discussed, including the process monitoring and quality control, prediction of the process window and optimization of the deposition toolpath. By combining appropriate ML methods, the AM development processes can be significantly expedited, and the quality of the deposited parts can be stabilized. Third, the status of research and application of ML in the development of new alloys for AM is introduced. The correlative applications mainly include alloy composition design and prediction of microstructure and property of the deposited alloys. Recent years witnessed growing research interests in the development of novel alloy materials used for AM (Fig. 8). Because it has been demonstrated that ML is an efficient way to accelerate the development period of novel alloy materials. With more available data accumulation, it can be expected that ML will have a broad prospect in novel alloy development for AM, which could create more high-performance alloys for harsh industrial applications.

Conclusions and Prospects: With the development of artificial intelligence and computer science, ML has been widely used in AM in recent years. The combination of ML and AM avoids a large quantity

of trial-and-error costs, thereby reducing the development period of the AM process. The present work reviews the progress of machine learning-based AM process optimization and the novel alloy materials developments. The application of ML in the control and optimization of the AM process includes the process monitoring, quality control, prediction of the process window and optimization of the deposition toolpath (Fig. 10). The research and application of ML in the development of novel alloy materials based on AM include alloy composition design, microstructure and property prediction. Finally, the future development trends of ML in the AM were outlined. In previous studies, the ML method usually focuses on a particular phase of the AM process, which significantly limits the application and promotion of machine learning. The development of the generic ML algorithm for the AM process will further promote the application of ML in the field of AM, which is also the critical research direction of machine learning-assisted AM in the future. For ML-based novel alloy materials developments in AM, a large number of studies have shown that ML can effectively avoid the high costs of the traditional trial and error methods. However, ML requires a large number of databases to train the model. As a result, the construction and development of an effective database is the precondition for ML. In recent years, a large amount of literature regarding AM of metallic materials has been published, which means a large amount of experimental data has been accumulated, and this is the fundamentals for the development of ML technology. With the development of practical data mining technology, the vast database will promote the development of novel metal materials for AM.

Keywords: Machine learning; novel material development; additive manufacturing; computational simulation; material genetic engineering