

基于机器学习的复合材料结构设计与性能表征研究进展

戚云超¹, 刘豫祺¹, 李鑫芳², 赵贵哲^{3*}

(1. 中北大学 航空宇航学院, 山西 太原 030051; 2. 中北大学 信息与通信工程学院, 山西 太原 030051;
3. 中北大学 功能高分子复合材料山西省重点实验室, 山西 太原 030051)

摘要: 复合材料因其具备轻量化、面内具有高强度、耐疲劳等特性, 在航空航天、工程建设领域得到了日益广泛的应用, 但同时其各向异性特征、复杂非线性结构等设计特点也使得传统的复合材料研发模式面临巨大挑战。传统研发方法依赖大量物理实验, 存在周期长、成本高、设计精度有限的局限性。机器学习技术的发展为材料科学带来了全新的研究思路, 该方法能够通过数据驱动的方式发掘材料结构与性能之间的深层数字规律, 取代仿真分析与重复实验的冗杂过程, 显著缩短新材料的研发周期, 降低研发成本。本文旨在从结构设计、性能表征和工艺优化三个方面系统性综述机器学习在复合材料研究中的应用现状与变革潜力。首先阐述了机器学习建立的高精度代理模型对复合材料结构设计参数优化效率的提升; 进而介绍了机器学习应用在复合材料多尺度性能表征中的突破, 从数据驱动下的性能预测和利用深度学习建立精确本构关系两方面剖析了该领域前沿的研究路径; 最后探讨了基于工艺参数智能调控的复合材料制造技术与生产流程中的智能排程问题, 指出了基于机器学习领域当前的数据质量、模型可解释性及产业链融合情况下利用机器学习方法进一步推动复合材料研究所面临的挑战与未来发展方向。

关键词: 机器学习; 复合材料; 结构设计; 性能表征; 智能制造

中图分类号: TB33

文献标识码: A

doi: 10.62756/jnuc.issn.1673-3193.2026.03.0002

引用格式: 戚云超, 刘豫祺, 李鑫芳, 等. 基于机器学习的复合材料结构设计与性能表征研究进展[J]. 中北大学学报(自然科学版), 2026, 47(4): 511-530.

Qi Yunchao, Liu Yuqi, Li Xinfang, et al. Research progress on machine learning-based structural design and performance characterization of composites[J]. Journal of North University of China (Natural Science Edition), 2026, 47(4): 511-530.

Research Progress on Machine Learning-Based Structural Design and Performance Characterization of Composites

Qi Yunchao¹, Liu Yuqi¹, Li Xinfang², Zhao Guizhe^{3*}

(1. School of Aerospace Engineering, North University of China, Taiyuan 030051, China;

2. School of Information and Communication Engineering, North University of China, Taiyuan 030051, China;

3. Shanxi Key Laboratory of Functional Polymer Composites, North University of China, Taiyuan 030051, China)

收稿日期: 2026-03-04

基金项目: 山西省基础研究计划青年科学研究项目(202503021212130); 功能高分子复合材料山西省重点实验室开放基金(FPC202401); 山西省聚酰胺材料技术创新中心开放基金(202601200003)

作者简介: 戚云超(1993—), 男, 副教授, 博士, 主要从事纤维复合材料力学性能的研究。E-mail: qiyu@nuc.edu.cn。

* 通信作者: 赵贵哲(1965—), 男, 教授, 博士, 主要从事树脂基纤维功能复合材料制备及成型新技术新工艺的研究。E-mail: zgzh@nuc.edu.cn。

Abstract: Composites have been increasingly applied in aerospace and engineering construction due to their multi-physical field coupling and anisotropic characteristics. However, their complex nonlinear structures posed significant challenges to the traditional research and development paradigm. The conventional trial-and-error approach, which relied heavily on physical experiments, was limited by long cycles, high costs, and difficulties in exploring the vast design space. The introduction of machine learning technologies brought novel research insights to materials science, enabling the exploration of the deep structure-property relationships of materials through a data-driven approach. This study aims to provide a systematic review of the current application status and transformative potential of machine learning in composite materials research, structured across three primary dimensions: structural design, performance characterization, and process optimization. The article first elucidated how high-fidelity surrogate models developed through machine learning significantly enhanced the efficiency of optimizing structural design parameters. Furthermore, it introduced breakthroughs in multi-scale performance characterization, delving into the research frontiers by exploring data-driven performance prediction and the utilization of deep learning architectures for the precise formulation of constitutive relations. Finally, the paper discussed intelligent manufacturing technologies of composites based on intelligent regulation of process parameters and intelligent scheduling in the production flow. It points out the challenges and future development directions of further promoting composites research using machine learning in view of current data quality, model interpretability, and industrial chain integration in the machine learning field.

Key words: machine learning; composites; structural design; performance characterization; intelligent manufacture

0 引言

作为现代工业的关键基础材料,复合材料自其出现开始便因其轻量化、面内具有高强度、耐疲劳等特性在航空航天和新能源等新兴领域取代了合金、普通塑料等传统材料,图1中的部分应用场景展现了复合材料在各领域蓬勃的发展态势^[1-2]。然而在复合材料学科高速发展的过程中也难免遭遇一些代表性的瓶颈问题:

1) 结构设计的实验成本高,研发周期长:绝大多数复合材料的性能取决于增强体、基体及界面的协同作用,这种多尺度效应导致在复合材料的结构设计过程中需要选取的设计参数数量呈指数级增长。传统材料的研发主要依赖“提出假设-实验验证”的研发模式^[3-4],这种方法依靠过往经验,在面对超高性能混凝土、纤维增强复合材料等复杂体系时,往往陷入周期长、成本高昂且效率低下的困境^[5-7]。随着计算机算力的提升与算法的迭代,复合材料研究正从实验科学、理论推演、计算模拟向“数据驱动”的第四范式转变^[8-10]。材料基因组计划的实施进一步加速了这一进程,通过高通量计算与机器学习方法的融合,能够从海

量数据中提取潜藏的物理规律,结合多目标优化模型来高效优化设计参数,可以显著缩短新材料的研发周期并降低研发成本^[11-12]。



图1 复合材料在航空航天等新型领域中的应用实例^[1-2]

Fig. 1 Application examples of composites in emerging fields such as aerospace^[1-2]

2) 在传统研究方法下进行的复合材料性能表征工作困难且低效。传统研究大量依赖拉、压、扭及各种仿真实验,在解决性能表征问题上工作

量大、处理周期长,面对数据间的高维,复杂非线性关系精度也较低。例如,针刺复合材料等复材的力学性能评估与断裂损伤机理解析,高度依赖大量物理实验与有限元仿真(如Abaqus),不仅存在实验成本高昂、研发周期漫长、难以遍历庞大设计空间的局限性,还难以精准捕捉针刺工艺参数(密度、速度、深度等)、细观结构特征(纤维交织、界面结合等)与宏观力学性能、断裂损伤演化之间的复杂非线性关联^[13]。庞大且日益发展充分的机器学习体系正在逐步解决这些问题,诸如物理信息神经网络(PINN)、卷积神经网络(CNN)、径向基函数神经网络(RBFNN)等机器学习/深度学习方法,以及遗传算法、粒子群算法等智能优化算法,已被证实能够高效挖掘材料构效关系,提升研发效率,揭示复杂物理机理,从而更好地实现复合材料的性能表征^[14-17]。

3) 部分复合材料制造工艺复杂,加工流程亟待优化。例如,传统三维针刺复合材料研究中就存在针刺工艺复杂、研究方法效率低下的问题,具体见图2。随着复合材料在工程运用中的地位逐渐深化,更加复杂的制造工艺不断推出,以提高生产效率或提升材料性能。机器学习为这些复杂工艺的增效优化提供了一条可行的路径。利用融合多种机器学习模型的预测框架实现对纤维型增强材料自动铺丝的铺放速度、压实压力、热气体温度等关键工艺参数的优化,兼顾了材料的高速生产需求与性能提升需求。进一步深化机器学习在复合材料生产中的运用,为实现复合材料制造的智能化提供了有效的技术支撑。

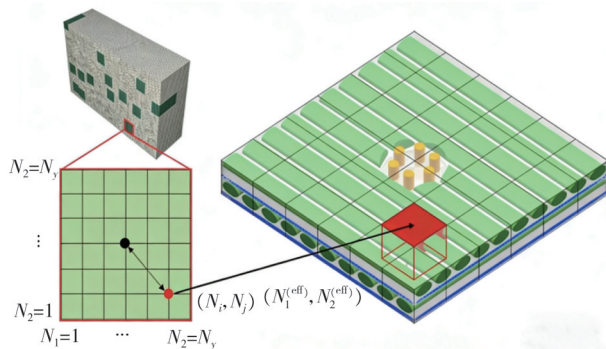


图2 传统三维针刺复合材料研究中使用的多尺度模拟方法^[13]

Fig. 2 Multi-scale simulation method used in the research of traditional 3D needled composites^[13]

随着科学研究向“数据驱动”第四范式的转变,人工智能技术已成为复合材料领域突破传统研发瓶颈的核心引擎^[18-19],如图3所示。其中,机器学习的应用最为成熟、广泛,其在复合材料的材料性能预测、结构设计、工艺优化等全生命周期的应用已取得丰硕成果。本文从面向材料科学的机器学习体系、针对复合材料的结构与性能优化、基于机器学习的复合材料性能表征方法、复合材料智能制造与工艺参数优化等多角度对研究现状依次进行梳理。最后,本文就复合材料的未来发展进行展望,着重论述了物理信息神经网络(PINN)和生成式人工智能(XAI)这类可解释机器学习方法在材料研究方面的应用,以及诸如三维针刺复合材料这类普遍运用传统力学研究方法的细化领域,在运用机器学习研究方法后可能带来的变革,其研究流程见图4。另外本文所用到的涉及机器学习方法名称缩写较多,表1中给出了这些英文缩写的详细解释。

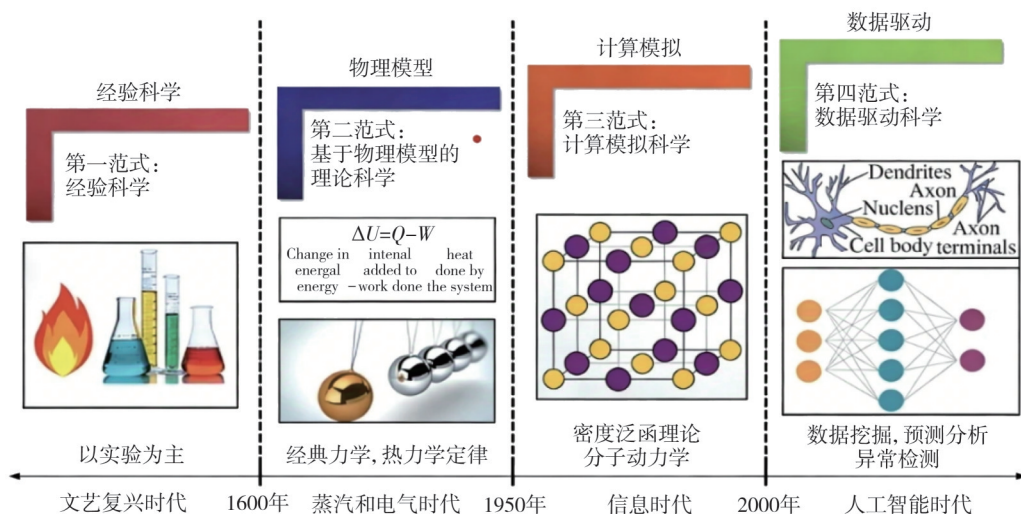


图3 人工智能方法推进科学研究向“第四范式”转变的过程^[18]

Fig. 3 Transformation process to the “fourth paradigm” of scientific research promoted by artificial intelligence methods

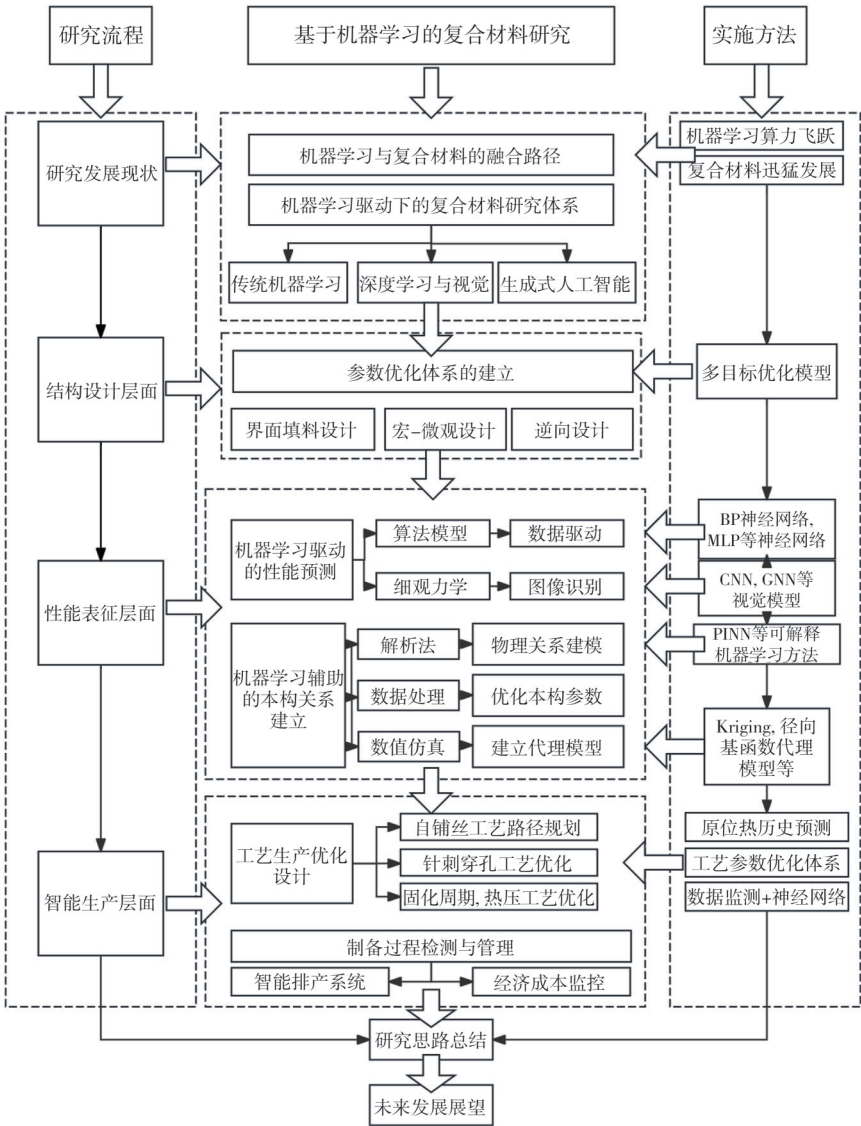


图 4 基于机器学习的复合材料研究路线图

Fig. 4 Research roadmap of composites based on machine learning

表 1 符号说明

Tab. 1 Symbol description

缩写	中文含义	缩写	中文含义
PINN	物理信息神经网络	GB	梯度提升回归
CNN	卷积神经网络	GFRP	玻璃纤维增强聚合物
RBFNN	径向基函数神经网络	PCA	主成分分析
XAI	生成式人工智能	DNNs	深度神经网络
MGI	美国材料基因组计划	PAMCs	颗粒增强铝基复合材料
LSTM	长短期记忆网络	RNN	循环神经网络
ResNet	残差网络	EA	进化算法
LR	线性回归	CV	计算机视觉
RR	岭回归	RVE	代表性体积元
DT	决策树	GBG	贪婪自适应算法
RF	随机森林	ANN	人工神经网络
GAN	生成对抗网络	FFRPCs	单向亚麻纤维增强树脂基复合材料
VAE	变分自编码器	ELM	极限学习机
GNN	图神经网络	AFP	自动铺丝
GIDNs	生成式逆设计网络	ATL	自动铺带
CFRP	碳纤维增强聚合物	ILSS	层间剪切强度
MFP	多模型融合预测算法	MFP	多模型融合预测算法
MLP	融合多层感知机	GFRP	玻璃纤维增强聚合物

1 机器学习驱动的复合材料研究现状

1.1 机器学习与复合材料的融合路径

早期机器学习受算法、算力和数据限制,多用于数据量小、特征明确、线性关系较强的研究,常被运用于计算机、信号处理、模式识别等领域。随着深度学习、大数据与高性能计算的兴起,机器学习逐步具备了处理高维数据、拟合复杂非线性关系、自动特征提取的强大能力,与更多的工程与学科产生了交叉与联系。从理论算法走向工程实用化的过程,也正是复合材料研究复杂度提升、数据量激增的关键时期。2011年,美国材料基因组计划(MGI)启动,推动材料研究从经验试错转向数据驱动、高通量计算与实验^[20]。在同一时间维度上,2012年 AlexNet 在 ImageNet 夺冠,标志着深度学习进入工程可用阶段, GPU 并行计算普及,高维非线性建模能力质变^[21]。同时,在这一节点前后,卷积神经网络(CNN)、LSTM、ResNet 等走向成熟,深度学习成为处理复杂数据的主流工具^[22]。机器学习解决了复合材料机理不清晰、实验成本高、规律难挖掘的痛点,而复合材料又为机器学习提供了典型的应用场景,因此机器学习与复合材料在研究路径上的有机结合有其必然性。

1.2 机器学习驱动下的复合材料研究体系

现阶段复合材料领域的机器学习应用可以区分出 3 种主要类型: 1) 以线性回归(LR)、岭回归(RR)等回归方法,支持向量机(SVM)、决策树(DT)、随机森林(RF)等分类算法等组成的传统机器学习方法,这些方法在机器学习理论体系中发展时间最长,多学科应用场景最丰富,模型稳定性已经得到了充分并良好的检验。传统机器学习在解决复合材料的设计、性能表征等任务时具备运算快、高可靠性的特点,而缺陷是处理高维复杂数据的能力不足,面对高维非线性问题时运算力差,精度不理想。2) 以卷积神经网络(CNN)、长短期记忆网络(LSTM)、循环神经网络(RNN)与 Transformer 模型等神经网络构成的深度学习方法,拥有强大的图像识别、时序数据处理等功能,在复合材料研究中常被用于纤维型复合材料与颗粒型复合材料的纤维取向、孔隙、裂纹、界面脱粘、颗粒分布等信息的识别与提取,其可以在短时间内总结大量实验现象数据,快速

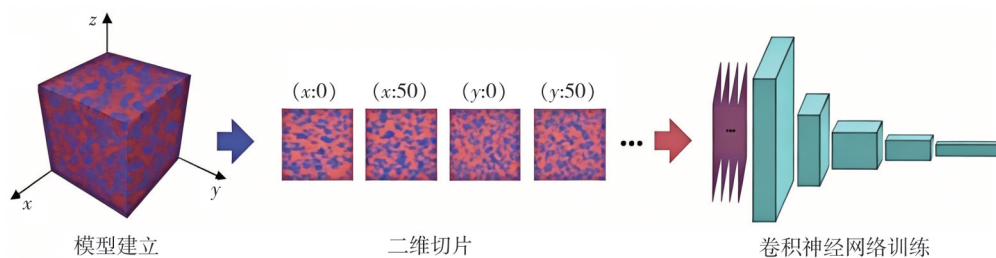
且精准地构建复合材料微观图像-力学性能的映射关系。3) 生成式人工智能也是目前较前沿的一个机器学习分支,其可以从学习分布中生成新数据/新结构,是材料实现“逆向设计”的关键。生成对抗网络(GAN)、变分自编码器(VAE)等模型已经可用于生成图像、微观结构的任务,推动了复合材料的微观结构生成与设计、配方与组分逆向设计的发展,是下一代复合材料研究的核心技术。下面对这些机器学习方法进行系统介绍:

1) 传统机器学习方法: 机器学习算法通过建立材料特征与目标性能之间的映射关系,为复杂复合材料的性能预测提供了高效手段。Chen 等^[23]指出,在进行复合材料结构设计时,机器学习方法相比有限元、分子动力学等常规方法,核心优势在于预测速度得到了数量级的提升,无需通过有限元方法烦琐的网格求解过程即可快速输出结果。此外,机器学习方法在小样本情况下可靠性更高,大幅降低了研发成本与周期。张峻铭等^[24]致力于用机器学习方法驱动高分子材料的性能优化,指出随机森林、支持向量机及人工神经网络等算法在处理小样本、高维度的材料数据时具有显著优势,能够有效拟合出指标间的非线性关系。卷积神经网络(CNN)具有强大的二维图像识别与训练潜质,如图 5(a) 所示,通过二维切片法将三维的复合材料结构进行切片处理,可以直接通过图像信息学习复合材料的微观结构,并精准预测其宏观性能。图 5(b) 展示了在进行同性复合材料层合板的渐进损伤问题研究时,可以直接将神经网络与力学模型相连,实现由间接测量数据构建的本构模型。此外,王亚龙等^[25]在研究中验证了力学理论指导下的机器学习模型能够进一步提升预测的泛化能力,这一方法在高分子材料性能优化及复合材料力学行为分析中已取得良好效果。以上研究展现出机器学习强大的跨学科融合能力,其通过高速预测能力、数据-图像信息多维度处理能力、非线性拟合能力等独特优势,现已深度融入了复合材料研究体系。

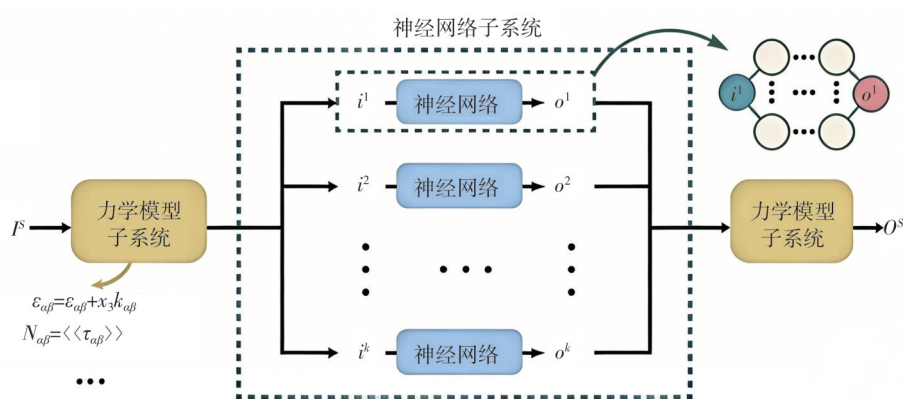
2) 深度学习与计算机视觉: 深度学习技术特别是卷积神经网络在图像处理领域的突破,为材料微观结构的自动化表征与定量分析提供了强有力的工具。陈永等^[26]认为,复合材料的性能与其微观结构形态密切相关,在结构-性能关联预测领域,传统的人工图像分析方法存在效率低下、主观性强的问题。孙世杰^[27]的研究表明,利用卷积

神经网络对金相显微镜照片、扫描电子显微镜图像及CT扫描数据进行处理,可以实现对微观结构的快速识别、分类与分割。图6展示了卷积神经网络的部分功能工作流程。这种方法在粉末冶金制品及化纤材料的缺陷检测与性能评估中已展现出极高的应用价值。

神经网络的部分功能工作流程。这种方法在粉末冶金制品及化纤材料的缺陷检测与性能评估中已展现出极高的应用价值。



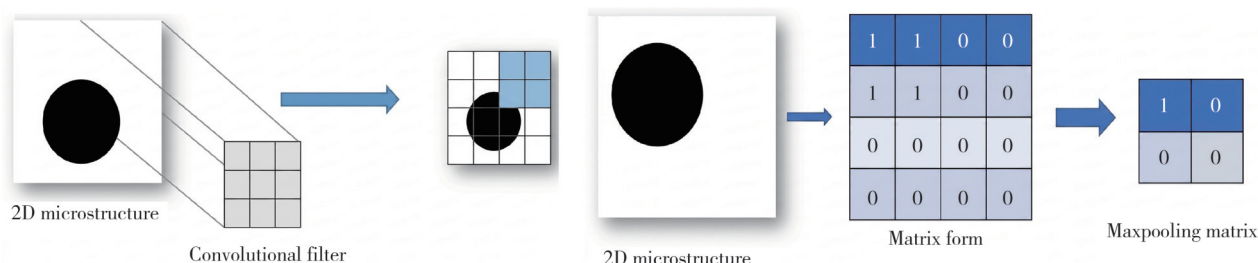
(a) 基于卷积神经网络的性能预测



(b) 基于神经网络的本构模型

图5 神经网络在复合材料性能表征方面的应用^[23]

Fig. 5 Application of neural network in performance characterization of composites^[23]



(a) 卷积层不同滤波器检测二维微观结构特征的流程

(b) 池化操作缩减图像形状流程

图6 卷积神经网络的简单工作流程^[16]

Fig. 6 Simple workflow of convolutional neural network^[16]

另一种常见的复合材料图像处理领域运用的深度学习技术是图神经网络(GNN),其工作原理如图7所示。Maurizi等^[28]指出,复合材料(如纤维增强复合材料、层状复合材料、晶格超材料)的力学响应(如应力、应变、变形场)与其几何拓扑、基体性能及边界条件密切相关,而传统有限元模拟等方法在处理复杂非线性现象(如塑性、屈曲不稳定性、界面起皱)时存在计算成本高、效率低下的问题。该研究表明,利用图神经网络(GNN)的网格-图映射特性,可从数百组训练数据中学习物理关联,精准捕捉微观结

构与宏观性能的内在联系。在对纤维型复合材料进行塑性行为分析和对层状复合材料界面起皱进行预测等领域已展现出替代传统数值模拟的趋势,大幅提升了研究的效率。

3) 生成式人工智能:生成式人工智能为解决材料“逆向设计”难题提供了全新的思路,即根据目标性能反向推导材料的微观结构或化学配方,同时大量减少了训练数据量。Chen等^[29]在研究中阐述了生成式逆设计网络(GIDNs)的应用原理,指出该模型由“预测器”和“设计器”两大深度神经

网络构成,通过学习大量复合材料样本的结构-性能关联规律,生成符合特定性能需求的全新微观结构设计方案。该研究创新性地采用反向传播技术等快速计算目标函数梯度,克服了陷入局部最

优解的困局,同时引入主动学习策略持续补充高性能样本,不仅使训练数据量减少了一个数量级,也使复合材料从目标性能到微观拓扑的结构关系能够通过数字间的直接关系得到精确呈现。

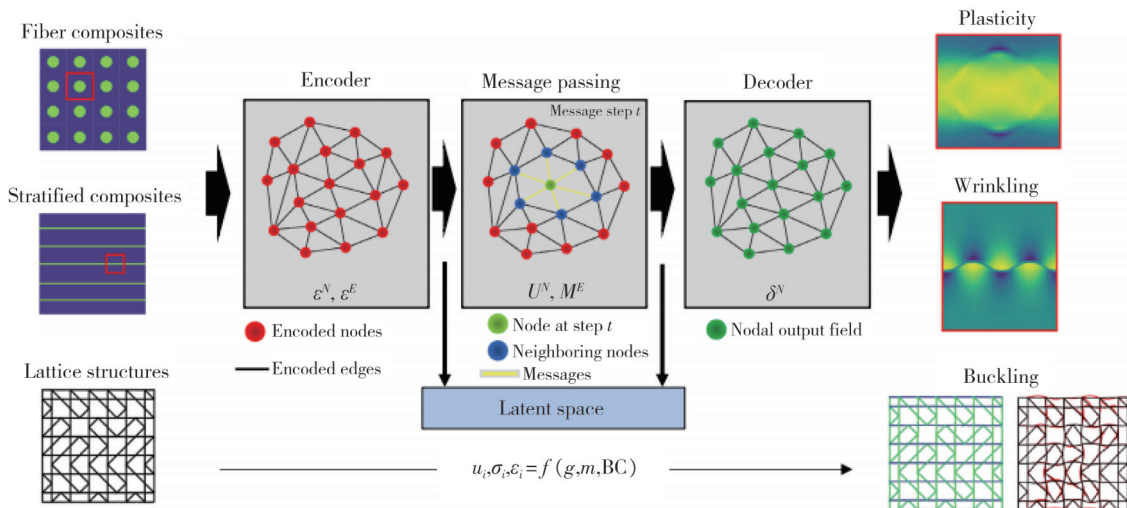


图7 图神经网络的简单工作流程^[28]

Fig. 7 Simple workflow of graph neural network^[28]

张恒睿等^[30]详细阐述了生成对抗网络(GAN)与变分自编码器(VAE)的应用原理,指出这些模型通过学习大量真实材料数据的分布规律,能够生成具有特定物理属性的全新材料结构。盛毓强等^[31]在电池材料与分子筛的研究中,成功利用生

成式模型设计了具有特定孔径分布或离子传输通道的新型结构。如图8所示,这一范式同样适用于复合材料的微观结构设计,如通过生成特定排列的纤维增强相或优化多孔材料的孔隙拓扑,可以实现轻量化与高强度的最佳平衡。

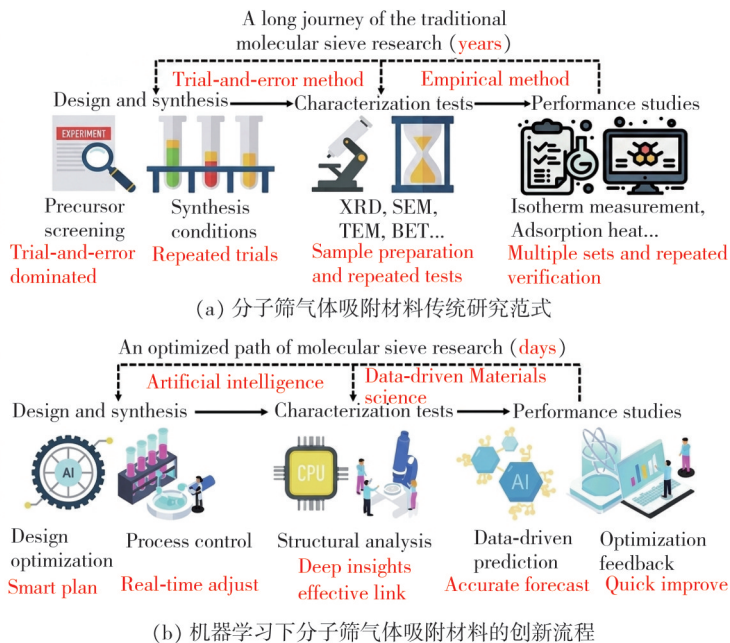


图8 机器学习改进下的分子筛创制及气体吸附^[31]

Fig. 8 Zeolite creation and gas adsorption improved by machine learning^[31]

传统机器学习、深度学习与生成式人工智能在复合材料研究中各自拥有其不可替代的技术优

势。复合材料研究中,常会混合搭配不同的机器学习方法来共同解决问题。传统机器学习以线性

回归、随机森林、支持向量机为代表,模型简单、训练快速、可解释性较强,适用于小样本、低维、线性关系强的材料性能预测,缺陷是难以处理微观图像、高维耦合数据等复杂信息。深度学习以卷积神经网络、图神经网络、长短期记忆网络为核心,拥有更加强大的特征提取与图像识别能力,可直接从微观结构图像、时序数据信息中提取、构建映射关系,显著提升缺陷检测、性能预测与本构模型的精度,不足是依赖大规模数据计算、计算成本高且缺乏可解释性。生成式人工智能以生成对抗网络、变分自编码器、生成式逆设计网络为前沿,突破了传统从结构到性能的设计局限性,可依据目标性能直接生成全新微观结构、组分配方与铺层方案,是实现复合材料逆向设计与创新创制的核心工具,但其当前仍处于数据需求大、机理融合浅、工程应用经验有限的发展阶段。三者协同构成了完整技术链条,共同支撑复合材料从研发到制造的全流程智能化升级。

2 基于机器学习的复合材料结构设计方法

2.1 参数优化体系设计

复合材料的配方设计往往涉及成本、力学强度、耐久性 & 施工性能等多个相互冲突的目标,传统单目标优化方法难以获得综合性能最优解。在解决一个复合材料的系统设计任务时,第一步首先是提取出对材料性能造成影响的设计参数,在设计指标等约束条件的范围内,通过调整多个设计参数使设计目标实现最大化,这要求研究者构建一个多目标优化模型。

Miller等^[32]研究了一种壳体承载结构的动态特性优化问题,其外壳为碳纤维增强聚合物(CFRP)和玻璃纤维增强聚合物(GFRP)两种材料组成的多层复合材料。该结构在工作时主要承受动载荷,为了兼顾优化复合材料夹层结构设计的振动安全性与缩减成本的指标,利用主成分分析方法(PCA),Miller等将不同层之间的纤维取向等主要的复合材料设计影响因素放入参数向量,分别以最大化固有频率与激励频率间的距离和最小化结构单位成本为目标函数,即对应结构设计中的两个主要任务建立了一个多目标优化模型。在优化过程中,多目标优化模型需要运用遗传算法反复评估目标函数,这一过程的计算成本可能

很高,尤其是在目标函数需要进行耗时的数值分析(如有限元法模拟)的情况下。为了显著缓解这一问题,如图9所示,该方法通过深度神经网络(DNNs)代理模型将MF建模方法与机器学习方法相结合,以高保真M1模型生成的伪实验数据构建数据集,由深度神经网络进行训练后输出目标函数值,实现数据模拟+机器学习的高效运算方法,大大提升了优化设计参数的速度。

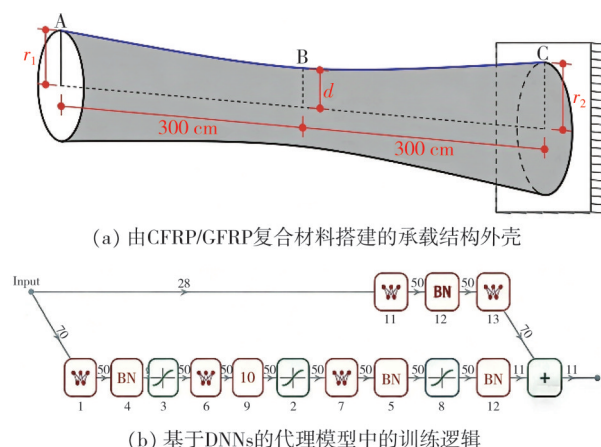


图9 基于机器学习的多层复合材料外壳的动态参数优化问题^[32]

Fig. 9 Dynamic parameter optimization of multi-layer composite shell based on machine learning^[32]

颗粒增强型复合材料的参数设计优化同样可以利用相似的研究思路高效完成。Jia等^[33]提出了一种基于颗粒增强铝基复合材料(PAMCs)力学性能预测的混合机器学习工作流程(PAMCs-MP),通过将迁移学习与基于Transformer的神经网络相结合来预测PAMCs的力学性能,模型框架如图10所示。迁移学习可将源域(铝合金)的知识迁移到目标域(PAMCs),解决小数据集问题;Transformer的自注意力机制能捕捉参数间的非线性依赖,二者结合为PAMCs性能预测提供了新思路。最后,基于PAMCs-MP模型建立了TiB₂增强铝铜合金基体优化、工艺优化和增强相优化三个层次的多目标优化模型,并通过基体成分优化、热处理工艺调控、增强相参数设计三个步骤,实现了强度与塑性的协同优化。

袁杰等^[34]在超高性能混凝土的配合比设计研究中采用了基于人工智能的多目标优化算法(如遗传算法与粒子群优化算法)。通过结合机器学习预测模型与多目标优化算法,实现了对水泥、硅灰、钢纤维及外加剂用量等多参数变量的精确调控,能够在庞大的数据组合中快速搜索帕累托最优解集,在保证材料超高强度的同时显著降低制备成本与碳排放,

推动了绿色高性能建材的智能化设计。

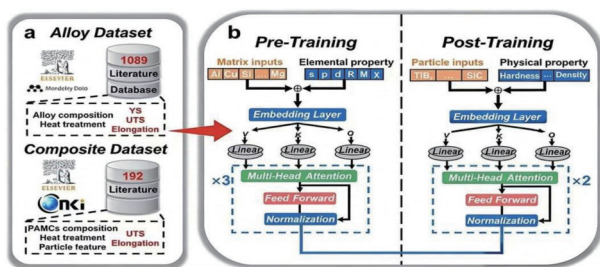


图 10 基于混合机器学习的颗粒增强铝基复合材料设计参数的多目标优化^[33]

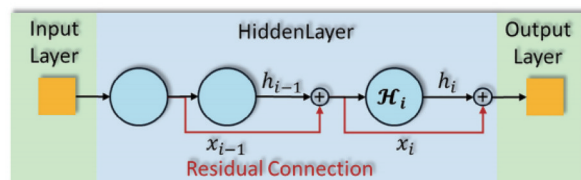
Fig. 10 Multi-objective optimization of design parameters for particle-reinforced aluminum matrix composites based on hybrid machine learning^[33]

2.2 界面与填料设计

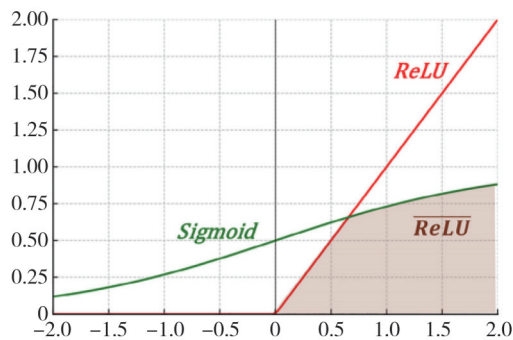
复合材料的界面是填料与基体之间的过渡区域,其中的界面结合强度、界面能、界面相结构、界面缺陷等材料性质直接决定了关键力学行为表现,进而显著影响复合材料的宏观性能。因此,界面性质是决定复合材料整体性能的关键因素,其中包含了对界面和复材填料两个优化设计方向。对界面的设计调控是复合材料设计的核心环节,通过精准控制界面结合强度、界面相结构和界面缺陷,可以实现对复合材料多种性能的协同优化,以满足不同工程应用的需求。利用机器学习进行复合材料界面与填料设计,核心是通过数据驱动方法拟合“填料特性-界面行为-宏观性能”的复杂非线性关系,实现从微观参数优化到宏观性能提升的精准调控,大幅缩短研发周期,降低试错成本。

在类似的材料领域中已有大量利用神经网络、深度学习等优化本构方程参数求解的研究。多层热塑性复合材料的层间黏结强度是决定其服役可靠性的核心指标,但传统研发中存在两大问题:一是共挤出工艺参数(温度、转速等)与结构参数(层厚占比、表面粗糙度等)的多维度耦合,难以通过经验试错找到最优匹配;二是层间黏结依赖分子扩散与机械啮合的协同效应,其复杂作用机制难以通过传统解析方法精准表征,导致这一材料的界面设计存在难题。Fang等^[35]有针对性地将13个关键参数(工艺+结构)与剥离强度建立关联,针对冲击改性聚苯硫醚(PPS)与高温聚乙烯(PERT)多层热塑性复合材料的共挤出制造场景,聚焦多层结构层间粘结强度(剥离强度)的精准预测这一界面设计问题。模型构建阶段,选定优化后的MLP(Adv MLP)模型解决了复合材料

多参数耦合下的非线性建模难题,精准捕捉界面融合与黏结强度的复杂关联作为核心预测模型,实现了剥离强度预测。Fang的研究很好地展现了搭建这一多层热塑性复合材料的界面设计问题的神经网络体系的研究思路:如图11所示,通过ReLU与Sigmoid函数的横向对比,展现出ReLU函数有效避免梯度消失且收敛更快的优势,故在隐藏层以ReLU为激活函数,输出层则选择Linear函数,通过Adam优化器最小化均方误差(MSE),并引入Dropout层(dropout rate=0.2)抑制过拟合。训练结果显示,该MLP模型在测试集上的决定系数 R^2 达0.968,平均绝对百分比误差(MAPE)仅2.3%,显著优于RF($R^2=0.892$, $MAPE=5.7\%$)与SVR($R^2=0.915$, $MAPE=4.2\%$),能够精准捕捉工艺与尺寸参数对层间黏结强度的非线性影响。



(a) 残差连接机理



(b) 激活函数选择

图 11 AdvMLP回归器示意图^[35]

Fig. 11 Schematic diagram of AdvMLP regressor^[35]

何林等^[36]结合分子动力学模拟与机器学习技术,构建了包含不同官能团、接枝率及填料类型的界面数据库,并训练机器学习模型预测界面结合能与应力传递效率,为新型界面分离材料及改性剂的创制提供了微观层面的设计指导。同时,在聚合物复合材料领域,何林等利用神经网络来辅助筛选最佳的填料几何形状与表面处理工艺,有效改善了纳米填料在基体中的分散性与团聚问题,从而大幅提升了材料的导电、导热及机械增强效果,实现了从分子尺度到宏观性能的跨尺度优化。

2.3 宏观与微观结构设计

复合材料的宏观与微观设计的核心目标是通过多尺度协同优化,使得材料的宏观综合性能满足实际应用需求的同时,确保微观结构设计能够支撑宏观性能指标。其设计方法核心是通过跨尺度数据驱动建模,建立从微观参数到宏观性能的非线性映射。机器学习方法的出现为数据驱动引擎提供了现实而高效的解决方案。针对航空航天及电磁防护等极端服役环境下的复合材料设计需求, Li等^[37]提出一种机器学习-分子动力学(ML-MD)分析框架用于预测聚合物复合材料微尺度界

面的内聚力。该框架可作为多尺度分析中微尺度界面性能的输入参数,降低了对传统分子动力学流程的依赖。孙升等^[38]提出了利用机器学习辅助的拓扑优化技术,其流程参见图12,其根据载荷路径与功能需求,自动生成复杂的材料分布与结构构型。在电磁防护材料研究中,姚理想等^[39]通过深度学习模型建立了微观电磁损耗机制与宏观结构参数之间的关联,逆向设计了具有宽频吸波性能的超材料结构。在空天新材料领域,该技术还被用于优化耐高温复合材料的编织结构与热防护涂层厚度,显著提升了飞行器的生存能力与服役寿命。

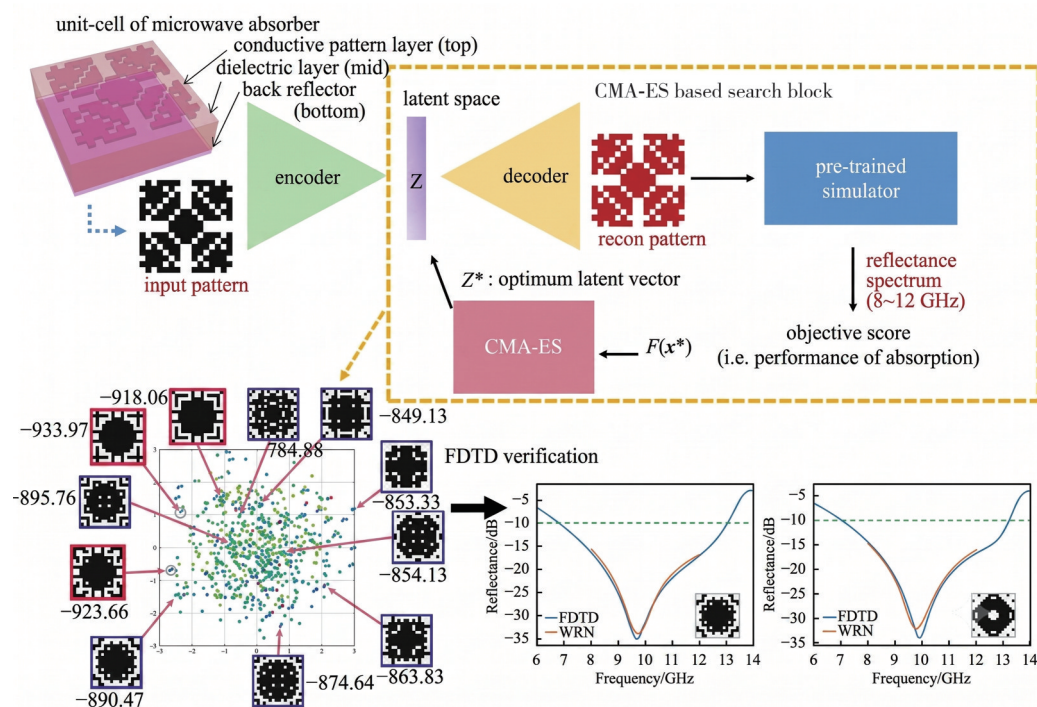


图12 通过深度学习驱动的复合材料电磁吸波体的宏观与微观设计^[38]

Fig. 12 Macro and micro design of composite electromagnetic absorber driven by deep learning^[38]

2.4 复合材料逆向设计

复合材料逆向工程是从目标性能与结构特征出发,反向推导复合材料的最优设计方案、组分配比、微观结构、工艺参数或铺层分布的工程方法,核心目标是绕开盲目实验,直接锁定满足工程需求的复合材料设计解,实现“性能定设计、功能定结构”的精准研发,是复合材料从“经验试错”走向“理性设计”的核心技术,已经广泛应用于4D打印活性复合材料、纤维增强复合材料、颗粒增强复合材料等体系的结构设计、性能定制与工艺优化等方面。

Sun等^[40]聚焦于复合材料的逆向工程,其团队利用多种不同成分组成的活性复合材料在环境

刺激下的变形现象设计了一种基于活性复合材料的4D打印方法。在打印结构的众多小体素预先设计好各种活性材料的分布方式,在刺激下材料可以改变为事先设计好的理想外形,从而具有极大的设计灵活性。这一巨大的设计空间也为高效找到合适的设计以实现目标形状变化带来了挑战。在已知的变形结果的基础上设计活性材料的排布成为该研究的核心问题,而机器学习方法为其解决这个复合材料逆向设计问题提供了核心路径:借鉴梁变形特性开发了一种基于循环神经网络(RNN)的机器学习模型,首先利用传统有限元方法获得训练集数据,经过RNN训练可用来预测材料的力学性能。随后该研究通过结合基于循环

神经网络(RNN)的机器学习和进化算法(EA),提出了一种用于体素化活性复合梁正向形状变化预测和逆向材料设计的高效方法,用于解决基于期望(或目标)形状变化寻找最佳性能分布设计的逆向问题。机器学习模型使进化算法能够在极大的设计空间中高效快速地解决逆向问题,其效率远

胜于有限元方法。最终快速获得了针对具有不同复杂度的多个目标形状的最佳性能分布设计。这种高效的ML-EA设计方法实现了一种新的流线型设计-制造范式,如图13所示,其中集成计算机视觉(CV)的ML-EA能够基于手绘线条快速制造具有形状变化的4D打印梁。

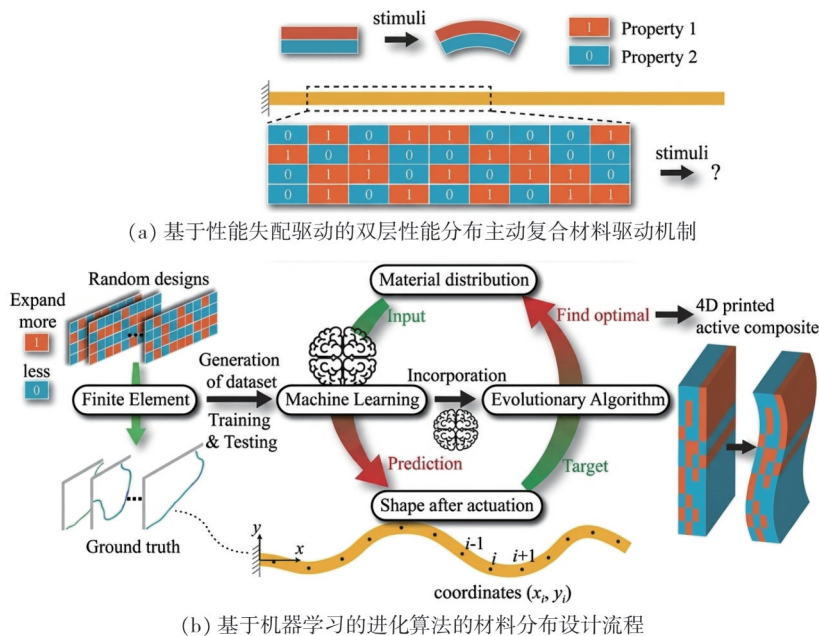


图 13 基于 ML-EA 设计的活性复合材料 4D 打印原理^[40]

Fig. 13 4D printing principle of active composites designed based on ML-EA^[40]

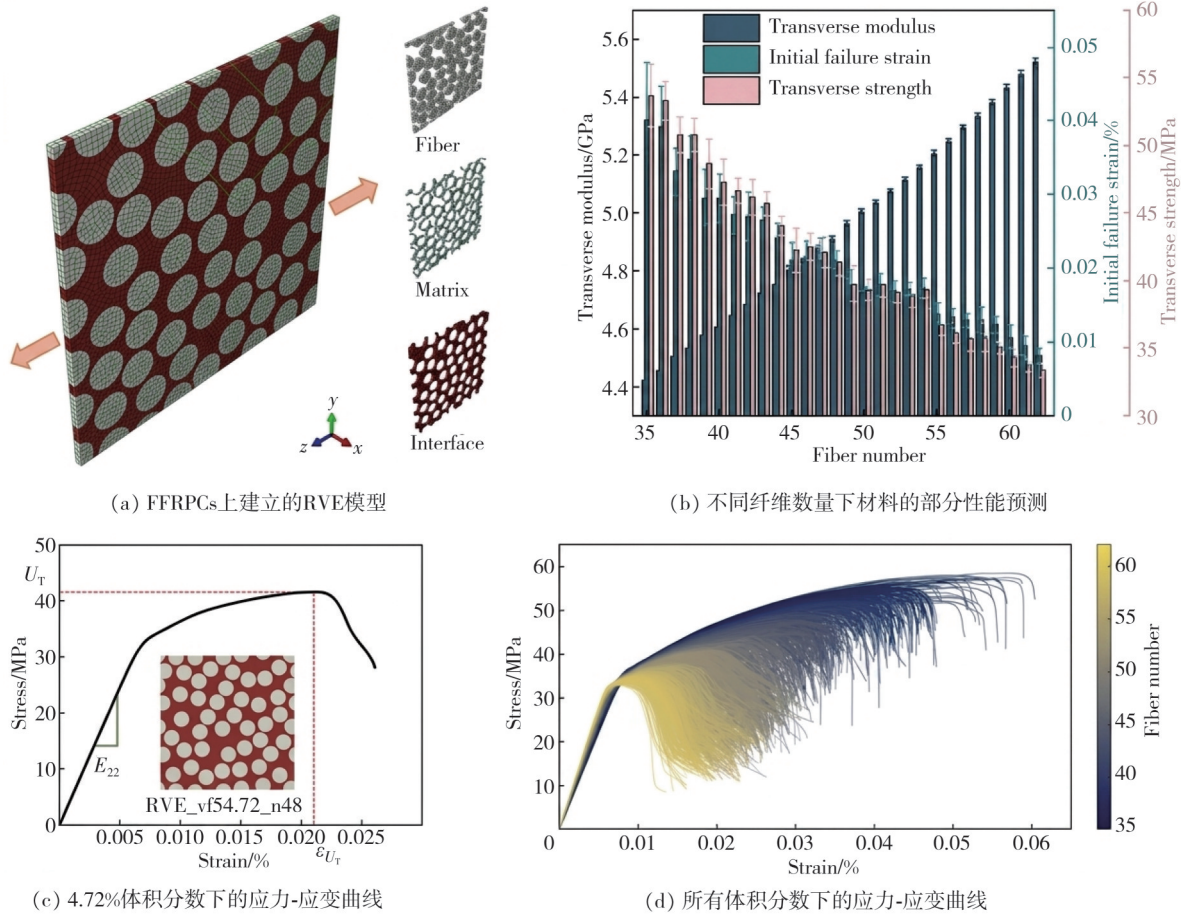
3 基于机器学习的复合材料高效性能表征

3.1 数据驱动的复合材料力学性能预测

作为一种强大的力学分析工具,有限元分析方法在传统复合材料研究中广泛用于材料力学性能的分析与预测。其中代表性体积元(RVE)的思想常被用于捕捉复合材料的微观结构的统计信息,进而推导出材料的宏观力学性能,完成性能表征。Duschlbauer 等^[41]和 Padovec 等^[42]都进行了基于蒙特卡洛算法开发 RVE 模型的研究,分别分析了机械载荷对短纤维复合材料热力学性能的影响和金属基复合材料的热弹性。但是,当复合材料中出现如基体体积分数变化等成分变动时,使用 FEA 方法就需要花费大量的时间成本与计算成本。基于机器学习的数据驱动预测方法为改进这一问题提供了新思路。

刘子琦等^[43]专注于单向纤维增强复合材料的

性能表征工作。如图 14 所示,其首先在研究材料上建立了包括网格划分、周期性边界条件及内聚力单元的 RVE 模型。改进的 RVEs 方法是在采用贪婪自适应(GBG)算法生成代表性体积单元的基础上,建立了联合卷积神经网络(CNN)与人工神经网络(ANN)的 CNN-ANN 数据预测模型,其中, CNN 可以高效处理复合材料纤维间的微观结构图像信息的识别,而人工神经网络则负责文本类数据的处理,该情况下可以同时处理 1400 个包含不同纤维分布图像数据和纤维最近邻信息文本数据的输入数据集。采用 CNN-ANN 等机器学习方法的融合预测模型在对单向亚麻纤维增强树脂基复合材料(FFRPCs)的预测上取得了良好的效果,各方向导热系数、横向拉伸模量、起失效应变等力学特征的拟合度 R^2 分别达到了 99%, 99.7% 和 87.1%。通过结合图像信息与文本数据,该融合模型的预测精度显著高于单一的 ANN 与 CNN 模型,是机器学习下复合材料性能表征的高效路径。

图 14 基于机器学习的单向纤维增强复合材料的性能表征^[43]Fig. 14 Performance characterization of unidirectional fiber-reinforced composites based on machine learning^[43]

3.2 机器学习辅助下复合材料本构关系的建立

建立本构关系是复合材料力学性能表征的关键环节,本构关系建立以物理机理为核心,依赖细观力学理论、实验测试与数值仿真的结合,核心思路是通过明确的物理公式或经验模型描述复合材料的应力应变关系,主要方法分为3类:1)解析法。基于细观力学理论,通过数学推导建立微观结构参数(纤维/填料含量、取向、界面特性)与宏观本构参数(弹性模量、泊松比、屈服强度)的映射关系。2)实验拟合方法。通过拉伸、压缩、剪切等标准试验采集应力-应变数据,利用经验公式拟合本构参数,建立宏观本构关系;缺点是精度依赖实验数据量和算法精度,存在实验成本高、周期长的局限。3)数值仿真方法。通过代表体积单元(RVE)、有限元(FEA)、分子动力学(MD)等仿真技术,模拟复合材料微观结构的力学响应,间接推导宏观本构关系;相比前两种方法存在计算效率低(复杂模型单组仿真耗时数小时至数天)、对微观结构建模精度要求极高的问题。随着机器学习方法与复合材料性能表征

研究的有机结合,上述本构方法均可用机器学习实现步骤的简化及体系革新。机器学习(ML)以数据驱动为核心,通过挖掘输入参数(复合材料细观参数)-输出参数(应力、应变等宏观性能参数)的非线性映射,突破了传统方法的局限。目前研究已形成从纯数据驱动到数据融合到跨场景应用的发展格局。

谌广昌^[44]基于Ramberg-Osgood三参数方程建立了高强玻璃纤维环氧复合材料厚板面内的剪切非线性本构关系架构,并对本构模型进行了参数识别。参数方程及其待求解参数为

$$\gamma_{i,j} = \frac{\tau_{i,j}}{G_{i,j}} + \left(\frac{\tau_{i,j}}{K_{i,j}} \right)^{\frac{1}{n_{i,j}}}, \quad (1)$$

式中: $\gamma_{i,j}$ 为DIC方法实测的剪应变; $\tau_{i,j}$ 为ANN预测的剪应力; $G_{i,j}$ 为剪切模量; $K_{i,j}$ 为正切-截距模量; $n_{i,j}$ 为待识别的本构参数。

传统FEMU方法需构建复杂的3D有限元模型,通过迭代修正获取2-3材料面剪切本构参数,该研究采用人工神经网络(ANN)替代传统有限元模型修正(FEMU)方法,可以快速精准地建立剪

切本构模型。首先以 Ramberg-Osgood 三参数方程为物理约束框架, 界定涵盖外加载荷、弹性模量、泊松比、剪切模量、非线性参数等的 16 维输入参数的范围与 3 个材料面剪切应力的输出参数。如图 15(a) 所示, 对 spt 实验所需的厚截面层板试验件进行 Abaqus 建模, 通过高保真 3D 有限元 (FEM) 计算生成 9 312 组有效数据, 经归一化与异常值剔除后划分为训练集与验证集; 随后设计应力预测神经网络, 如图 15(b) 所示, 该人工神经网络包含 16 个神经元与三隐藏层的双阶段全连接 ANN 模型, 激活函数采用 ReLU, 输出层分别对应收敛判断布尔值与三向剪切应力; 最后结合数字图像相关技术 (DIC) 实测的 SPT 试验件 2-3 材料面剪切应变、分线性段 (弹性阶段) 与非线性段 (载荷 $> 1\,500\text{ N}$) 反演本构参数, 线性段通过最小二乘回归拟合剪切模量 $G_{2,3}$, 非线性段采用 L - M 梯度优化算法最小化预测应变与实测应变差值平方和, 获取非线性参数 $K_{2,3}$ 和 $n_{2,3}$ 。

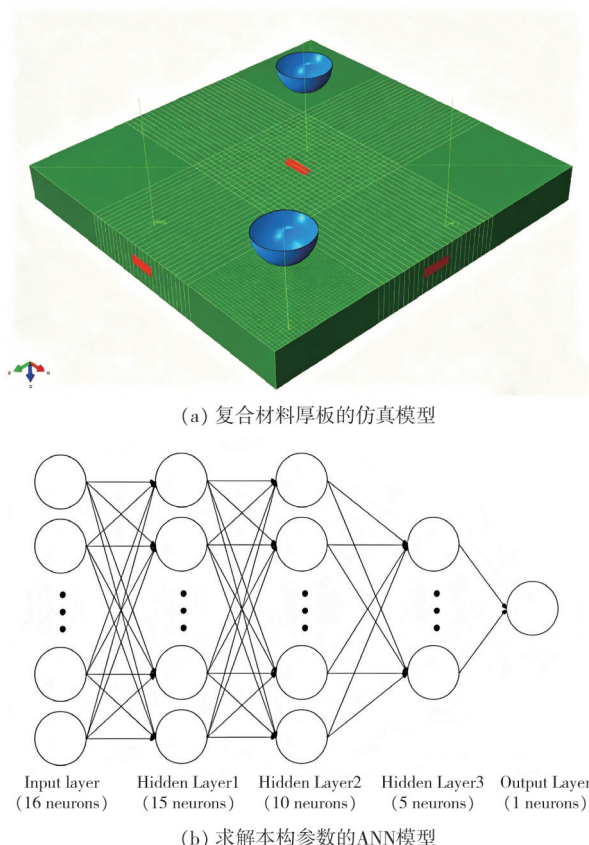


图 15 复合材料厚板本构模型的建立过程^[44]

Fig. 15 Establishment process of constitutive model for composite thick plate^[44]

在大幅优化求解速率, 缩减原始数据集的同时, 最终得到的本构参数与传统 FEMU 方法的偏差 $\leq 8\%$,

实现了高效、精准的剪切本构模型构建^[44]。

在类似的材料领域中已有利用神经网络、深度学习等优化位数较多的本构方程参数求解的研究。针对 Monel K-500 合金热变形场景, 研究者通过热压缩实验获取多工况下的应力-应变数据, 采用极限学习机 (ELM) 和支持向量机 (SVM) 构建本构模型, 以变形温度、应变速率、应变为输入, 流动应力为输出, 实现了比传统应变补偿 Arrhenius 模型更精准的预测^[45]; 面向颗粒材料, 有研究结合细观力学理论与门控循环单元 (GRU), 通过离散元数值试验生成数据, 以有向图整合细观组构信息, 构建双子网深度学习模型, 有效捕捉了复杂加载工况下的应力-应变响应及组构演化规律^[46]。

4 复合材料的智能制造

4.1 生产工艺的优化设计

4.1.1 自动铺丝/铺带路径规划

制造复杂层压复合材料结构的关键技术之一是自动铺丝 (AFP) 工艺, AFP 工艺中使用的是一种与纤维铺放头相连的龙门/机器人系统。纤维铺放头将多条复合材料带 (即丝束) 铺设在工具表面上。加热、压实和张力系统为丝束与基材之间的黏合提供了适宜的工艺条件。对于许多轻质复合材料而言, 自动铺丝 (AFP) 与自动铺带 (ATL) 技术是实现大尺寸构件高效制造的关键。AFP 制造复合材料的主要工艺参数包括固结力、铺放速度和热气炬 (HGT) 温度, 以及其他 50 多个参数, 通过改变这些工艺参数来获得最佳产品特性是一个复杂的非线性优化问题。

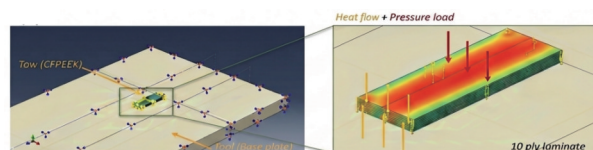
Mujtaba 等^[47]指出, 机器学习算法在自动铺丝 (AFP) 工艺的热历史预测与过程监控中发挥着核心作用。结合对铺放速度、压实压力、热气体温度等关键工艺参数的优化, 可以有效避免层间结合不充分的制造缺陷, 保障复合材料的层间剪切强度。自动铺丝技术 (AFP) 制造的层合板的层间剪切强度 (ILSS) 在很大程度上取决于铺层间界面处的原位温度历程。制造过程中界面原位热分布的偏差会因黏结不足而影响最终复合材料的强度。现有的 AFP 工艺控制过程难以同时调增 50 多种控制变量, 尤其对原位热历史的预测精度较低。因此, 该团队提出了融合多元线性回归、支持向量机、人工神经网络等的机器学习预测框

架,能够根据 AFP 工艺参数精准拟合并预测铺放过程中的热特征,具体如图 16 所示,可以看出,预测热历史的参数化曲线与实验数据基本重合,预测精度显著提升,实现了 AFP 工艺的数字化监控^[39]。Mujtaba 指出,人工智能算法在复杂曲面构件的路径规划中发挥着重要作用。通过优化铺丝角度、重叠率及间隙宽度,可以有效减少褶皱、架桥等制造缺陷。该方法基于强化学习的路径规划算法,能够根据构件的几何特征实时调整铺丝头的运动轨迹与工艺参数,在保证力学性能的前提下最大化生产效率,实现了复合材料构件的数字化与精密化制造。

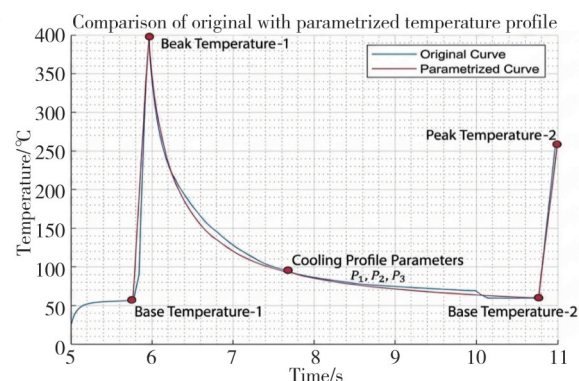
4.1.2 针刺穿孔工艺优化

针刺工艺是制备纤维复合材料预制体的核心干法成型工艺之一。如图 17 所示,其原理为利用带有倒钩的刺针做上下往复的穿刺运动,刺透纤维毡后,通过倒钩将下层纤维牵伸至上层,使不同层的纤维相互缠结、勾连,形成具有三维立体网络结构的预制体,以此提升预制体的整体性、孔隙结构均匀性及力学性能^[48]。运用此类针刺工

艺生产的三维针刺复合材料因其工艺简便、成本较低,兼具轻量化、高韧性与抗分层能力,被广泛应用于航空航天、高温防护等领域。



(a) 自动铺丝 AFP 操作示意图



(b) 机器学习预测的参数化曲线与原始温度曲线的对比

图 16 自动铺丝工艺示意图与原位热历史预测效果图^[47]

Fig. 16 Schematic diagram of automatic fiber placement process and prediction effect of in-situ thermal history^[47]

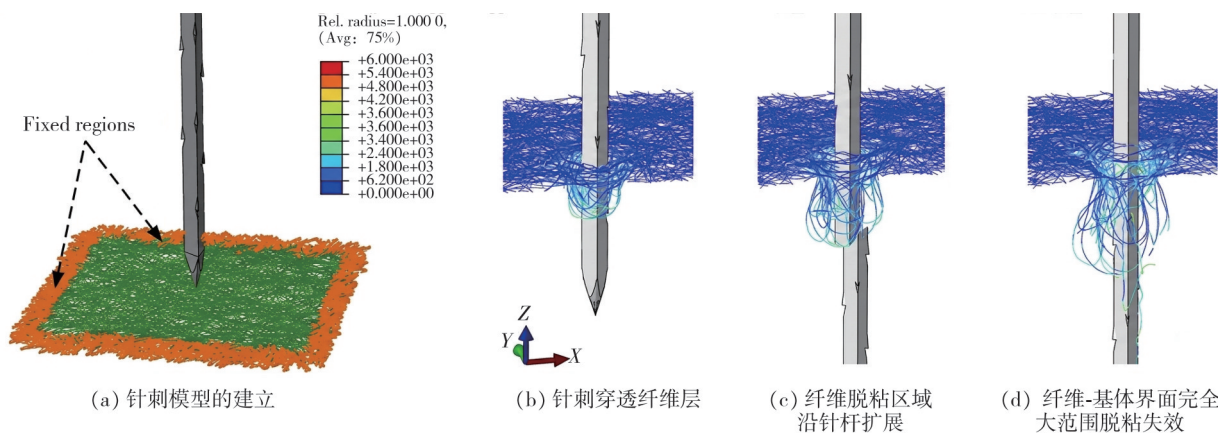


图 17 三维针刺复合材料的针刺仿真过程^[48]

Fig. 17 Needling simulation process of 3D needled composites^[48]

戚云超等^[49]针对机器学习方法优化针刺工艺进行了系统性研究。该研究以三维针刺 C/C-SiC 复合材料预制体为研究对象,以机器学习方法为核心完成了工艺优化,通过相关性分析确定了针刺深度、针刺密度、布针方式三个主要工艺参数优化方向。将复合材料面内拉伸模量、面外拉伸模量、面内剪切模量、面外剪切模量作为多优化目标,通过权重法为各目标赋予均等权重(0.25),构建了综合刚度性能的单目标适应度函数,将多目标优化问题转化为更易求解的单目标优化问题。团队基于包含非针刺、单独针刺、表

层针刺、重复针刺四类区域的单胞有限元模型,选取针刺深度、针刺密度、布针方式三类核心优化参数的不同水平,随机组合生成 20 组工艺参数并完成有限元模拟,获取了对应刚度性能数据组成机器学习的训练集,再将训练完成、且能高精度预测刚度性能的 BP 神经网络嵌入改进后的遗传算法,形成性能预测—参数寻优的代理模型,由网络快速预测对应的复合材料刚度性能及综合刚度适应度值,再将该值反馈给遗传算法进行参数筛选,替代传统复杂的有限元计算,大幅提升了优化效率。表 2 展示了复合材料优化工艺后的

力学性能,可见该方法工艺参数优化后材料的力学性能得到显著提升。

表 2 不同算子的工艺参数优化前后力学性能对比^[49]

Tab. 2 Comparison of mechanical properties before and after process parameter optimization with different operators^[49]

遗传算子类型	E_1/GPa	E_2/GPa	G_{12}/GPa	G_{23}/GPa	f/GPa
未优化	57.51	20.92	14.09	9.86	28.31
正弦算子	63.88	46.27	14.20	9.47	28.45
S型算子	64.11	45.80	14.38	9.56	33.46

4.1.3 固化周期与热压工艺优化

热固性复合材料的固化过程涉及复杂的化学反应与热物理变化,不当的固化工艺会导致残余应力过大和构件变形。Wu等^[50]建立了BP神经网络(GA-BP)机器学习模型,可精准预测特定温度-时间曲线对应的固化度演化规律。该方法大幅缩短了热固性复合材料固化工艺计算的耗时,显著

提升了热固性复合材料构件的成型质量与制造效率。张润博等^[51]建立了固化工艺参数(温度、压力、时间)与固化度、内部温度场及变形量之间的预测模型,为了实时调整固化过程中固化温度和固化压力等工艺参数,又基于神经网络模型数值和神经网络优化提出了一套处理实时数据的参数控制系统,构造如图 18 所示。其利用光纤光栅传感器检测复合材料的固化过程,实现了固化周期的动态优化。此外,蔡志亮等^[52]在储能电池材料的化工开发中,提出了结合原位监测数据与寿命预测模型对反应过程进行实时调控的方法。这一方法同样适用于复合材料的热压罐工艺,通过实时监测模具温度和树脂流动状态,AI系统可自适应调整加热速率和保压时间,显著提升了制品的尺寸稳定性与力学性能。

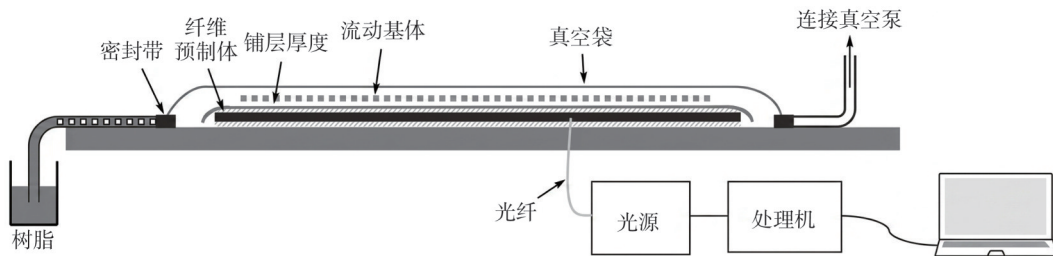


图 18 数据监测-神经网络优化复合材料固化过程的参数控制系统^[51]

Fig. 18 Parameter control system for composite curing process optimized by data monitoring-neural network^[51]

4.2 制备过程监测与管理

在复合材料的生产作业中,应用智能排程算法可以有效缩短生产周期,降低在制品库存,提高设备利用率,实现生产过程的精益化与敏捷化

管理。孙平^[53]提出一种基于多模型融合预测算法(MFP)的智能排产系统,如图 19 所示。系统通过对机台运行数据、工单信息参数的提取,融合多层感知机(MLP)、决策树(DT)与梯度提升回归(GB)三类模型的优势精准预测了机台运行时长。

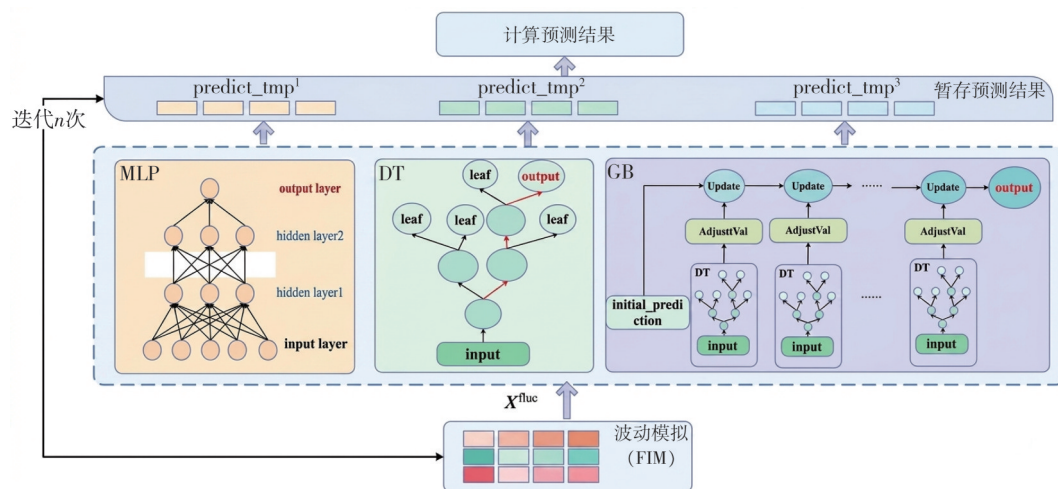


图 19 基于多模型融合预测算法的复合材料排产系统设计思路^[53]

Fig. 19 Design idea of composite scheduling system based on multi-model fusion prediction algorithm^[53]

基于该预测结果,进一步通过贪心算法动态生成优化排产方案,有效适配多品种、小批量的定制化生产需求。复合材料的生产涉及原材料预处理、成型、固化、后处理及检测等多个工序,生产流程的合理排程直接影响企业的运营效率与交付能力。覃香梅等^[54]开发了基于人工智能的高级计划与排程系统(APS),该系统能够综合考虑设备产能、订单优先级及物料供应等约束条件,生成最优的生产作业计划。在铝基新材料及复合材料加工企业中,应用智能排程算法可以有效缩短生产周期,降低在制品库存,提高设备利用率,实现生产过程的精益化与敏捷化管理。

复合材料的工程应用不仅需要关注技术性能,还需要综合考量全生命周期的经济成本。贺启明^[55]的研究表明,人工智能技术在建设工程项目的造价管理中展现出巨大潜力。通过分析历史项目数据和市场价格波动,并利用机器学习辅助能够实现对复合材料工程成本的精准估算与动态控制,可以在设计阶段即对材料选用方案进行经济性评估,优化资源配置,并在施工与运维阶段实时监控成本偏差,从而为复合材料在大型基础设施中的推广应用提供科学的决策支持与成本管控方案。

5 结论与展望

机器学习技术的迅猛发展为复合材料的设计、制造与应用带来了革命性的机遇。本文对复合材料领域中的机器学习研究方法进行了深度总结,在复合材料研究中的机器学习算法体系方面,系统介绍了复合材料在结构设计、性能表征、生产工艺优化等方面的研究思路,得出结论:传统机器学习、深度学习及生成式人工智能等算法的应用,实现了从组分筛选、结构逆向设计到工艺参数智能调控的全流程赋能,显著提升了研发效率与制造质量。随着算法的迭代与物理机制的深度融合,机器学习与复合材料的结合必将推动复合材料技术向着更加精准、高效与智能的方向发展,加速新一代高性能复合材料在航空航天、能源交通及基础设施等领域广泛应用。目前,此类研究还面临着一些普遍性的问题,包括:1)基于机器学习(如BP神经网络等)的模型具有不可解释的“黑箱”属性,使机器学习方法在进行复合材料的性能表征尤其是在建立本构关系方面的参

与程度有限,现有研究应用多集中在数据驱动的力学性能预测与参数拟合方面,对于物理原理与复杂力学演化过程(如断裂损伤)的分析与解释的贡献较低,限制了机器学习方法在复合材料研究中的应用深度。2)受限于复合材料结构复杂、分支众多的特点,相比传统材料(合金等)中机器学习体系化的广泛应用,复合材料的众多分支领域(如三维针刺复合材料)中的机器学习路径仍有待进一步普及,应用范围还存在较大的开拓空间。综上,未来机器学习与复合材料研究可以从以下方向实现融合发展:

1) 标准化数据共享平台建设。复合材料领域存在实验数据稀缺、标准不一等小数据难题,亟待搭建全面覆盖材料信息、具备统一数据标准的标准化数据共享平台,全面推动数据驱动的复合材料智能化研发。相比图像识别或自然语言处理领域的海量数据,材料领域的实验数据获取成本高昂、周期长,且不同实验室之间的数据标准不统一,导致可用训练样本稀缺。数据分布的不均衡与噪声干扰也严重影响了模型的泛化能力与预测精度。未来需要建立标准化的复合材料数据共享平台,发展迁移学习、少样本学习及数据增强技术,利用有限的实验数据挖掘更有价值的规律,打破数据孤岛,促进机器学习模型在材料领域的广泛应用。该平台应该首先统一数据标准,覆盖纤维、基体、界面、微观结构、工艺参数、力学性能、物理性能、失效行为等全维度信息,从原材料、制备工艺、结构参数到宏观性能的完整设计环节实现完整数据闭环,实现实验数据、仿真数据、文献数据、工业数据的标准化,从源头消除数据异构性。同时,平台还应集成各种数据处理功能,集成数据清洗、异常值剔除、数据增强等工具模块,做到数据统一,功能集成,为今后的复合材料机器学习研究提供规范、高效的数据平台。

2) 可解释机器学习模型应用。针对现有机器学习模型缺少物理可解释性、难以支撑机理研究的痛点,未来可以大力推进物理信息神经网络(PINN)等可解释机器学习方法研究,重点发展基于可解释机器学习模型下的复合材料本构建模、损伤演化与失效分析等核心方向,更加高效、精准地揭示材料内部复杂力学机理。发展物理信息神经网络(PINN)与可解释性人工智能(XAI)等方法,通过将力学方程、热力学定律等物理约束嵌入神经网络的损失函数或结构中,不仅能提高模

型的可解释性与鲁棒性,还能深化对复合材料损伤演化、界面失效等复杂物理机制的理解。当前机器学习技术在对材料进行机理分析(如建立材料的本构关系,进行失效分析建立断裂模型)等方面的运用仍有所欠缺。而运用此类可解释人工智能可以极大地提高此类机理建模的效率,极有可能在未来衍生出如下主要研究方向:①基于PINN的复合材料本构关系体系的构建。通过物理信息神经网络构建本构关系时不依赖传统假设,直接从应力-应变场、实验载荷-位移数据出发构成训练集,将经典平衡方程、本构关系、物理方程等嵌入损失函数,使神经网络在拟合数据的同时严格遵守物理定律,显著提高利用神经网络所建模型的可解释性,比传统力学构建复合材料的复杂本构关系的研究效率有了显著提高。②复合材料损伤演化/失效的分析。采用物理信息神经网络(PINN)开展复合材料损伤演化及失效分析时,以损伤场空间分布数据、实验测得载荷位移及材料断裂特征参数为基础,构建训练数据集。同时,将连续介质损伤力学方程、断裂能守恒准则、界面应力连续与跳跃条件等核心物理约束嵌入神经网络的损失函数中,可使神经网络在精准拟合复合材料损伤演化规律、捕捉失效临界特征的同时,能够严格遵循热力学守恒定律与断裂力学基本原理,不仅有效提升了所构建损伤演化与失效预测模型的物理可解释性,而且对比传统力学方法在模拟复合材料复杂损伤演化过程、预测材料失效路径与失效模式方面,显著提升了研究的效率与精度。

3) 研究方法创新。当前纤维增强树脂基、金属基等主流复合材料已广泛应用了机器学习技术,但三维针刺材料等特种复合材料仍受工艺-性能非线性建模难、微观跨尺度机理表征不准、多模式耦合损伤难以精准预测的传统研究瓶颈制约,亟需机器学习方法、数据驱动等技术来推动研究方法创新。三维针刺复合材料、三维编织复合材料、超材料基复合材料等细分分支领域,仍普遍依赖实验设计-数值仿真-机理建模的传统研究路径,实验周期、仿真复杂度及机理建模的高物理理论要求均限制着复合材料在这些细分领域的进一步发展。以三维针刺复合材料为例,其作为航空航天、国防装备等领域的关键结构材料,具有界面作用复杂、损伤演化机理复杂,非线性显著推导困难等特点。这类复合材料在传统研究

方法上面临三大核心瓶颈:①以针刺工艺参数为代表的参数(针刺密度、针迹深度、纤维铺层角度)与材料宏观力学性能(拉伸强度、弯曲模量、抗冲击性)之间的映射关系高度非线性,需要依赖大量正交实验才能初步建模,研发周期长达数月至数年;②微观结构(纤维束交织形态、孔隙分布、针刺损伤区域)对宏观性能的影响机制难以通过传统仿真精准表征,传统研究方法建立物理模型的难度极高,导致模型缺乏可解释性,且理论结果与实验存在偏差;③损伤演化过程(纤维断裂、界面脱粘、基体开裂的耦合效应)具有强随机性,传统断裂力学模型难以全面捕捉多模式失效路径。结合前文论述,三维针刺材料的3个瓶颈问题与机器学习的优势高度契合,可通过引入人工神经网络,卷积神经网络(ANN+CNN)加速数据驱动的非线性关系求解,通过物理信息神经网络(PINN)来辅助机理建模,加强模型的可解释性,实现复合材料领域的“数据驱动+机理辅助”的融合路径,突破传统研究瓶颈,进而达到通过机器学习带来的算法创新实现复合材料学科的研究方法—研究效率—科研深度的全面飞跃。

利益冲突声明/Conflict of Interests

所有作者声明不存在利益冲突。

All authors declare no relevant conflict of interests.

参考文献:

- [1] 谢军波. 针刺预制体工艺参数建模及复合材料本构关系研究[D]. 哈尔滨: 哈尔滨工业大学, 2016.
- [2] 陈振. 针刺C/C-SiC复合材料双轴失效机制及高温拉伸性能研究[D]. 哈尔滨: 哈尔滨工业大学, 2018.
- [3] Bai X P, Zhang X C. Artificial intelligence-powered materials science [J]. Nano-Micro Letters, 2025, 17 (1): 135.
- [4] Alam M A, Sohel A, Hasan K M, et al. Machine learning and artificial intelligence in diabetes prediction and management: a comprehensive review of models [J]. Innovatech Engineering Journal, 2024, 1 (1): 107-124.
- [5] 钱学胜. 材料领域的人工智能新变革[J]. 科学画报, 2025, 86(2): 14-15.
- [6] 王铃. 利用人工智能加速先进材料开发[J]. 石油炼制与化工, 2025, 56(4): 131.
- [7] 杨忠伟, 王壮壮, 段宏基, 等. 碳纤维增强环氧电磁屏蔽材料层间互锁结构的构筑与性能调控[J]. 中北

- 大学学报(自然科学版), 2025, 46(3): 278-284.
- Yang Zhongwei, Wang Zhuangzhuang, Duan Hongji, et al. Construction of interlayer interlocking structure in carbon fiber reinforced epoxy electromagnetic shielding material and its property regulation[J]. Journal of North University of China (Natural Science Edition), 2025, 46(3): 278-284. (in Chinese)
- [8] 代梦艳, 刘喆, 彭文联, 等. 人工智能加速材料发现与生成[J]. 防化研究, 2022, 1(1): 53-58.
- Dai Mengyan, Liu Zhe, Peng Wenlian, et al. Material discovery and generation accelerated by artificial intelligence[J]. CBRN Defense, 2022, 1(1): 53-58. (in Chinese)
- [9] Kauwe S K, Rhone T D, Sparks T D. Data-driven studies of Li-ion-battery materials [J]. Crystals, 2019, 9(1): 54.
- [10] Liu Y L, Niu C, Wang Z, et al. Machine learning in materials genome initiative: a review [J]. Journal of Materials Science & Technology, 2020, 57: 113-122.
- [11] 崔国祥, 李瑞, 袁昌驰, 等. 人工智能驱动集成电路下一代互连材料设计: 进展与挑战[J]. 中国材料进展, 2025, 44(5): 436-450.
- Cui Guoxiang, Li Rui, Yuan Changchi, et al. AI-driven design of next-generation interconnect materials for integrated circuits: progress and challenges [J]. Materials China, 2025, 44(5): 436-450. (in Chinese)
- [12] Huang J S, Liew J X, Ademiloye A S, et al. Artificial intelligence in materials modeling and design [J]. Archives of Computational Methods in Engineering, 2021, 28(5): 3399-3413.
- [13] Wang R Q, Liu Y, Liu X, et al. Assessment of mechanical properties for three-dimensional needled composites: a geometric partitioning strategy dealing with mesoscopic needling damage [J]. Materials, 2022, 15(16): 5659.
- [14] 贾宇翔, 王甲富, 陈维, 等. 基于智能算法的超材料快速优化设计方法研究进展[J]. 雷达学报(中英文), 2021(2): 220-239.
- Jia Yuxiang, Wang Jiafu, Chen Wei, et al. Research progress on rapid optimization design methods of metamaterials based on intelligent algorithms[J]. Journal of Radars, 2021(2): 220-239. (in Chinese)
- [15] 谢冰冰, 赵峰, 郭昕兴, 等. 基于物理信息神经网络的风电机组塔筒概率疲劳寿命预测方法[J]. 中国机械工程, 2026, 37(5): 1017-1025.
- Xie Bingbing, Zhao Feng, Guo Xinxing, et al. A probabilistic fatigue life prediction method for wind turbine towers based on a physics-informed neural network [J]. China Mechanical Engineering, 2026, 37(5): 1017-1025. (in Chinese)
- [16] Béji H, Kanit T, Messenger T. Prediction of effective elastic and thermal properties of heterogeneous materials using convolutional neural networks [J]. Applied Mechanics, 2023, 4(1): 287-303.
- [17] Määttä J, Bazaliy V, Kimari J, et al. Gradient-based training and pruning of radial basis function networks with an application in materials physics [J]. Neural Networks, 2021, 133: 123-131.
- [18] 杜传忠, 李钰葳. 人工智能与大数据深度融合驱动科技创新范式变革的机制与路径[J]. 社会科学研究, 2026(1): 30-40.
- Du Chuanzhong, Li Yuwei. How the deep integration of AI and big data drives paradigms of scientific and technological innovation: mechanisms and pathways [J]. Social Science Research, 2026(1): 30-40. (in Chinese)
- [19] 尹万健, 刘森, 龚新高. 人工智能驱动下的材料科学范式变革: 方法、平台与应用前沿[J]. 科学通报, 2025, 70(24): 4012-4014.
- Yin Wanjian, Liu Miao, Gong Xingao. Paradigm shift in materials science driven by artificial intelligence: methods, platforms, and frontiers of applications [J]. Chinese Science Bulletin, 2025, 70(24): 4012-4014. (in Chinese)
- [20] Ward C. Materials genome initiative for global competitiveness: [R/OL]. 2012-06-20. <https://asm.confex.com/asm/aero12/webprogram/Paper32109.html>.
- [21] Krizhevsky A, Sutskever I, Hinton G E. ImageNet classification with deep convolutional neural networks [C]//Advances in Neural Information Processing Systems, 2012: 1097-1105.
- [22] Graves A, Mohamed A R, Hinton G. Speech recognition with deep recurrent neural networks [C]//2013 IEEE International Conference on Acoustics, Speech and Signal Processing, 2013: 6645-6649.
- [23] Chen C T, Gu G X. Machine learning for composite materials [J]. MRS Communications, 2019, 9(2): 556-566.
- [24] 张峻铭, 杨伟东, 李岩. 人工智能在复合材料研究中的应用[J]. 力学进展, 2021, 51(4): 865-900.
- Zhang Junming, Yang Weidong, Li Yan. Application of artificial intelligence in composite materials [J]. Advances in Mechanics, 2021, 51(4): 865-900. (in Chinese)
- [25] 王亚龙, 王亦秋. 人工智能驱动下高分子材料性能优

- 化的技术创新研究[J]. 中国发明与专利, 2025, 22 (S1): 153-160.
- Wang Yalong, Wang Yiqiu. Research on technological innovation of performance optimization of polymer materials driven by artificial intelligence [J]. China Invention & Patent, 2025, 22 (S1): 153-160. (in Chinese)
- [26] 陈永, 袁雪, 刘空军. 人工智能辅助的化纤材料性能测试虚拟实验平台构建与应用[J]. 化纤与纺织技术, 2025, 54(9): 233-235.
- [27] 孙世杰. 人工智能被应用于粉末冶金制品的开发与表征[J]. 粉末冶金工业, 2022, 32(2): 61.
- [28] Maurizi M, Gao C, Berto F. Predicting stress, strain and deformation fields in materials and structures with graph neural networks [J]. Scientific Reports, 2022, 12: 21834.
- [29] Chen C T, Gu G X. Generative deep neural networks for inverse materials design using backpropagation and active learning [J]. Advanced Science, 2020, 7(5): 1902607.
- [30] 张恒睿, 徐熹骏, 李瑀琿, 等. 生成式人工智能在电池研究中的应用: 现状与展望[J]. 物理化学学报, 2025, 41(10): 1-10.
- Zhang Hengrui, Xu Xijun, Li Xunlu, et al. Applications of generative artificial intelligence in battery research: current status and prospects [J]. Acta Physico-Chimica Sinica, 2025, 41(10): 1-10. (in Chinese)
- [31] 盛毓强, 安少杭, 马梦瑶, 等. 人工智能在分子筛创制及气体吸附研究中的应用[J]. 现代应用物理, 2025, 16(1): 199-205.
- Sheng Yuqiang, An Shaohang, Ma Mengyao, et al. Application of artificial intelligence in novel molecular sieve gas adsorption materials [J]. Modern Applied Physics, 2025, 16(1): 199-205. (in Chinese)
- [32] Miller B, Ziemiański L. Accelerating multi-objective optimization of composite structures using multi-fidelity surrogate models and curriculum learning [J]. Materials, 2025, 18(7): 1469.
- [33] Jia Q T, Xu K, Li C H, et al. Transfer learning-assisted multi-objective optimization of mechanical properties for particle reinforced aluminum matrix composites[J]. Materials Futures, 2026, 5(1): 015602.
- [34] 袁杰, 王军博, 陈歆, 等. 人工智能在超高性能混凝土中的应用研究进展[J]. 吉林大学学报(工学版), 2025, 55(3): 771-789.
- Yuan Jie, Wang Junbo, Chen Xin, et al. Research progress on application of artificial intelligence in ultra-high performance concrete[J]. Journal of Jilin University (Engineering and Technology Edition), 2025, 55 (3): 771-789. (in Chinese)
- [35] Fang W, Duncan M, Dua M, et al. Machine learning-assisted design of multilayer thermoplastic composites: robust neural network prediction and feature importance analysis[J]. Macromolecular Materials and Engineering, 2025, 310(9): 70005.
- [36] 何林, 贺常晴, 隋红. 人工智能驱动新型界面分离材料的创制[J]. 化工进展, 2024, 43(4): 1649-1654.
- He Lin, He Changqing, Sui Hong. Prospects for the creation of novel interfacial separation materials driven by artificial intelligence [J]. Chemical Industry and Engineering Progress, 2024, 43(4): 1649-1654. (in Chinese)
- [37] Li Z, Du J, Yi H, et al. Machine learning framework for evaluating microscale interface cohesive zone models of polymer composites[J]. ACS Applied Materials & Interfaces, 2025, 17(45): 62590-62605.
- [38] 孙升, 陈伟远, 尚卿. 人工智能辅助空天新材料设计研究进展[J]. 航空制造技术, 2025, 68(18): 26-44.
- Sun Sheng, Chen Yiyuan, Shang Qing. AI-assisted design of aerospace advanced materials: recent advances and perspectives [J]. Aeronautical Manufacturing Technology, 2025, 68(18): 26-44. (in Chinese)
- [39] 姚理想, 黄贤俊, 陈泓廷, 等. 人工智能赋能电磁防护材料研究进展及思考[J]. 强激光与粒子束, 2025, 37(8): 089001.
- Yao Lixiang, Huang Xianjun, Chen Hongting, et al. Advances and perspectives in artificial intelligence-empowered electromagnetic protection materials research [J]. High Power Laser and Particle Beams, 2025, 37(8): 089001. (in Chinese)
- [40] Sun X H, Yue L, Yu L X, et al. Machine learning-evolutionary algorithm enabled design for 4D-printed active composite structures [J]. Advanced Functional Materials, 2022, 32(10): 2109805.
- [41] Duschlbauer D, Böhm H J, Pettermann H E. Computational simulation of composites reinforced by planar random fibers: homogenization and localization by unit cell and mean field approaches[J]. Journal of Composite Materials, 2006, 40(24): 2217-2234.
- [42] Padovec Z, Ružička M, Sedláček R, et al. Comparison of the thermoelastic properties of a randomly reinforced composite computed by the classical lamination theory and by the Monte Carlo simulation[J]. Mechanics of Composite Materials, 2017, 53(2): 149-158.

- [43] 刘子琦, 陈刚, SU Zhoucheng, 等. 基于细观力学和机器学习的纤维增强复合材料热-力多物理性能预测[J]. 复合材料学报, 2026, 43(2): 1200-1215.
Liu Ziqi, Chen Gang, Su Zhoucheng, et al. Thermo-mechanical multiphysical properties prediction of fiber-reinforced composites based on micromechanics and machine learning [J]. Acta Materiae Compositae Sinica, 2026, 43(2): 1200-1215. (in Chinese)
- [44] 谌广昌. 高强玻纤复合材料厚板三维本构关系参数识别技术研究[D]. 南京: 南京航空航天大学, 2022.
- [45] 张振, 朱明渝, 付绪楷, 等. 基于机器学习的 Monel K-500 合金热变形行为及本构关系研究[J]. 精密成形工程, 2025, 17(11): 242-251.
Zhang Zhen, Zhu Mingyu, Fu Xukai, et al. Hot deformation behavior and constitutive relationship of monel K-500 alloy based on machine learning[J]. Journal of Netshape Forming Engineering, 2025, 17(11): 242-251. (in Chinese)
- [46] 瞿同明, 冯云田, 王孟琦, 等. 基于深度学习和细观力学的颗粒材料本构关系研究[J]. 力学学报, 2021, 53(9): 2404-2415.
Qu Tongming, Feng Yuntian, Wang Mengqi, et al. Constitutive relations of granular materials by integrating micromechanical knowledge with deep learning [J]. Chinese Journal of Theoretical and Applied Mechanics, 2021, 53(9): 2404-2415. (in Chinese)
- [47] Mujtaba A, Islam F, Kaeding P, et al. Machine-learning based process monitoring for automated composites manufacturing[J]. Journal of Intelligent Manufacturing, 2025, 36(2): 1095-1110.
- [48] Xie J B, Chen X M, Zhang Y F, et al. Experimental and numerical investigation of the needling process for quartz fibers[J]. Composites Science and Technology, 2018, 165: 115-123.
- [49] 戚云超, 方国东, 梁军, 等. 三维针刺 C/C-SiC 复合材料预制体工艺参数优化[J]. 材料工程, 2020, 48(1): 27-33.
Qi Yunchao, Fang Guodong, Liang Jun, et al. Optimization of process parameters of three-dimensional needled preforms for C/C-SiC composites[J]. Journal of Materials Engineering, 2020, 48(1): 27-33. (in Chinese)
- [50] Wu C C, Zhang R M, Zhao P Y, et al. Curing simulation and data-driven curing curve prediction of thermoset composites[J]. Scientific Reports, 2024, 14: 31860.
- [51] 张润博, 于柏峰, 遇家运. 人工智能在纤维增强复合材料制造中的应用研究[J]. 高科技纤维与应用, 2024, 49(6): 37-47.
Zhang Runbo, Yu Baifeng, Yu Jiayun. Research on the application of artificial intelligence in the manufacturing of fiber reinforced composite materials[J]. Hi-Tech Fiber and Application, 2024, 49(6): 37-47. (in Chinese)
- [52] 蔡志亮, 黄杰明, 姚学轩, 等. 人工智能在储能电池材料化工开发与寿命预测中的应用[J]. 皮革与化工, 2025, 42(5): 4-6.
Cai Zhiliang, Huang Jieming, Yao Xuexuan, et al. The application of artificial intelligence in the development of energy storage battery materials and chemical engineering [J]. Leather and Chemicals, 2025, 42(5): 4-6. (in Chinese)
- [53] 孙平. 基于多模型融合预测算法的智能排产系统[J]. 信息技术与信息化, 2025(10): 3-9.
- [54] 覃香梅, 黄丹妹, 黄靖惠. 人工智能高级排程系统在铝基新材料加工企业的应用[J]. 中国金属通报, 2025(2): 115-117.
- [55] 贺启明. 人工智能及高科技材料在建设工程项目造价管理中的应用[J]. 居舍, 2024(31): 26-28.