

Editorial

材料基因工程专题主编寄语

王海舟^a, 谢建新^b

^a Beijing Advanced Innovation Center for Materials Genome Engineering, China Iron and Steel Research Institute Group, Beijing 100081, China

^b Beijing Advanced Innovation Center for Materials Genome Engineering, University of Science and Technology Beijing, Beijing 100083, China



王海舟



谢建新

21世纪之交,随着计算机和信息技术的飞速发展,数据采集、获取和处理的能力不断增强,科学技术发展迈入了一个海量数据+人工智能的新阶段,也称为“第四范式”,其目标是提高研发效率,缩短研发周期,降低研发成本[1]。2011年美国宣布实施材料基因组计划(MGI)[2],这恰好与材料科学长期以来的追求不谋而合。材料基因组计划开辟了一条具有前瞻性的研发新路径,其通过将计算、实验、数据技术与理论相结合,建立以数据驱动的材料预测新模型,变革传统的实验试错法。材料基因组计划推出不久,世界各国也相继启动了类似的研究计划。欧盟启动了第七框架计划下的“加速冶金学”“2012—2022年欧洲冶金复兴计划”“地平线2020”“石墨烯旗舰”等计划,以加速高性能合金及新一代材料的研发。德国相继颁布“材料研究(1984—1993年)”“材料技术”“为工业和社会而进行材料创新”“关于实施工业4.0战略的建议白皮书”“数字战略2025”等计划,以鼓励各种社会力量参与新材料研

发。日本启动“元素战略研究(2007年)”“元素战略研究基地(2012年)”“创新实验室构筑支援事业之信息复合型物质材料开发(2015年)”“信息集成型物质和材料研发计划”“2015年版制造白皮书”等计划。韩国启动“新增长动力产业规划及发展战略”“纳米融合2020项目”“第三次科学技术基本计划”“未来增长动力落实计划”“韩国3D打印产业振兴计划(2017—2019年)”等计划。俄罗斯发布了“2030年前材料与技术发展战略”和“至2030年科技发展预测”。

我国于2016年正式启动“材料基因工程关键技术与支撑平台”重点专项,围绕实现研发周期缩短一半、研发成本降低一半(即“两个一半”)的战略目标,构建支撑我国材料基因工程研究和协同创新发展的高通量计算、高通量合成与表征和专用数据库等三大示范平台,研发材料的高通量计算方法、高通量制备技术、高通量表征与服役评价技术、面向材料基因工程的材料大数据技术四大关键技术,并在能源、生物医用、稀土功能、催化、特种合金等五类典型材料开展应用示范,以验证研发技术的先进性和适用性,实现新材料研发由传统“经验指导式”向“理论预测、实验验证”新模式的转变及突破。

本期材料基因工程专题共收录了6篇材料基因工程相关论文,涉及以下方面:

刘梓葵在《数据生态系统——数据海》一文中提出需要一种链接数据存储和数据反馈的新工具的观点,从而建立材料数据和新型“材料基因”的可持续

生态系统的的海，其作用超越用个别相图预测失效行为。

汪洪等在《数据驱动的材料创新基础设施》一文中认为，作为一种新的材料创新范式，材料基因工程需要一个全新的以数据为中心的基础设施，其中包括数据设施、高通量实验和高通量计算，涵盖数据的产生和利用。数据设施包括基于AI方法的建模软件工具库与符合材料基因工程理念的数据库。理想情况下，数据应通过“数据工厂”的高通量实验和计算快速生成，“数据工厂”是一个能够批量生产的集中式或虚拟链接平台，以确保数据高度集成化、系统化、一致性和全面性。

数据标识符（DID）是各种数据库中必不可少的标签，在范式向以数据为中心的材料信息学转变的时代尤为重要。王毅等发表了一篇题为《数据标识编码——连接材料基因组工程数据库与可传承集成智能制造的桥梁》的文章，提出了一种由一组构建链组成的DID通用格式，该DID灵活方便，可以在各种云平台之间扩展和共享。因此，可以通过智能手机或特定机器构造和精确识别/解码经典的二维码。通过将这些二维码作为基于云平台链接的一组数据的指纹，可以自发地跟踪“成分—工艺—组织结构—性能”工作流过程中的进度/更新。

组合材料科学可以简化合成过程，并通过多种表征技术进行数据管理。Naila M. Al Hasan等在题为《Ni-Ti-Cu-V四元薄膜库中微观结构和相变的组合合成和高通量表征》的研究中，采用磁控溅射法在热氧化硅片上制备了具有成分分布的Ni-Ti-Cu-V薄膜阵列。使用高通量

波长色散光谱、同步辐射X射线衍射和电阻测量等对Ni-Ti基形状记忆合金的相变温度和微观结构进行了研究，基于薄膜库的局部微观结构和组成，讨论了四元体系相图和功能特性与薄膜库的局部微结构及组成的相关性。

实际材料是复杂而又多元的，其本质具有非均匀性。任何材料在特定尺度下都不可能是绝对均匀的，实际材料可视为不同部位具有微小差异的“自然芯片”。王海舟等在《高通量统计映射表征技术研究进展及其应用》一文中综述了多尺度高通量统计映射表征技术的研究进展，并介绍了其在钢铁、高温合金、镀锌和硅铁合金等材料中的应用。

计算机模拟已成为材料基因工程的重要组成部分，在材料科学领域发展迅速。Zhong等在题为《Grade 91钢抗蠕变性能的计算热力学研究》一文中，通过仿真结果解释了影响Grade 91钢的抗蠕变性的机理，并通过优化钢的成分、焊接及热处理工艺参数，为提高Grade 91钢在高温下的抗蠕变性能提供了可能的解决方案，以改善合金的抗蠕变性能，防止IV型裂纹的产生，对今后合金的发展具有指导意义。

References

- [1] Hey T. The fourth paradigm: data-intensive scientific discovery. Tansley S, Tolle K, editors. Redmond: Microsoft Research; 2009.
- [2] National Science and Technology Council. Materials genome initiative for global competitiveness. Washington, DC: National Science and Technology Council; 2011.