

物理冶金信息指导机器学习的镍基单晶 高温合金蠕变寿命预测

付佳博¹, 王晨充¹, MATEO Carlos Gracia², CARABALLO Isaac Toda²,
CABALLERO Francisca Garcia², 于 皓¹

(1. 东北大学 轧制技术及连轧自动化国家重点实验室, 辽宁 沈阳 110819)

(2. 西班牙国家冶金研究中心物理冶金系, 西班牙 马德里 28040)

摘 要: 蠕变寿命是影响镍基单晶高温合金材料服役寿命和力学性能的关键材料参数。因此, 如何准确有效地预测合金的蠕变寿命具有重要现实意义。尽管多年来许多研究学者已经建立起多种蠕变寿命的预测模型, 但是由于不同温度应力下的蠕变机制复杂且蠕变过程涉及长时间的显微组织演化, 已有模型尚难以实现有效预测。对此, 采用物理冶金原理指导下的数据挖掘结合机器学习这一研究策略, 通过文献调研建立起了高温低应力下的镍基单晶合金的高质量蠕变数据集, 在物理冶金原理指导下对原始数据进行挖掘, 提高了原始数据的内在质量, 并基于 Pearson 系数和随机森林平均精确度降低值分别对原始数据特征进行了相关性分析和重要性评估, 表明所建立的数据集符合基本的物理冶金学机制, 同时阐明了引入的三维物理冶金信息对于蠕变寿命预测的重要意义。随后, 基于机器学习方法在数据挖掘后的数据集上对合金的蠕变寿命进行了预测, 并根据平方相关系数(R^2)、平均绝对误差(MAE)和过拟合程度评估了不同的机器学习模型。结果表明, 支持向量回归(SVR)模型在本研究中具有较好的泛化能力且不容易过拟合, 同时结合了物理冶金信息的机器学习模型拥有更好的预测准确性和泛化能力。最终成功地建立起了高温低应力下镍基单晶高温合金成分、工艺以及引入的物理冶金参数和蠕变寿命之间的关系, 能够实现对镍基单晶高温合金蠕变寿命的有效预测, 并有望应用于基于合金服役条件的成分工艺的反向设计。

关键词: 镍基单晶高温合金; 机器学习; 蠕变寿命; 高温低应力

中图分类号: TP181; TG132.3 **文献标识码:** A **文章编号:** 1674-3962(2023)09-0722-10

引用格式: 付佳博, 王晨充, MATEO Carlos Gracia, 等. 物理冶金信息指导机器学习的镍基单晶高温合金蠕变寿命预测[J]. 中国材料进展, 2023, 42(9): 722-731.

FU J B, WANG C C, MATEO C G, *et al.* Creep Life Prediction of Ni-Based Single Crystal Superalloys by Physical Metallurgy Information Guided Machine Learning[J]. Materials China, 2023, 42(9): 722-731.

Creep Life Prediction of Ni-Based Single Crystal Superalloys by Physical Metallurgy Information Guided Machine Learning

FU Jiabo¹, WANG Chenchong¹, MATEO Carlos Gracia², CARABALLO Isaac Toda²,
CABALLERO Francisca Garcia², YU Hao¹

(1. The State Key Laboratory of Rolling and Automation, Northeastern University, Shenyang 110819, China)

(2. Department of Physical Metallurgy, National Centre for Metallurgical Research (CENIM-CSIC),
Avda. Gregorio del Amo, Madrid 28040, Spain)

收稿日期: 2022-12-05 修回日期: 2023-04-21

基金项目: 国家重点研发计划项目(2021YFB3702500)

第一作者: 付佳博, 男, 1999 年生, 博士研究生

通讯作者: 于 皓, 男, 1991 年生, 博士后,

Email: yuhao@ral.neu.edu.cn

王晨充, 男, 1988 年生, 副教授, 博士生导师,

Email: wangchenchong@ral.neu.edu.cn

DOI: 10.7502/j.issn.1674-3962.202212004

Abstract: Creep life is a key material parameter affecting the service life and mechanical properties of Ni-based single crystal superalloys. Therefore, how to predict the creep life of alloys accurately and effectively is critically important for engineering. To address this issue, a physical metallurgy (PM)-guided machine learning (ML) model is developed. Firstly based on literature research, a high quality creep

dataset of single crystal at high temperature and low stress is established. Under the guidance of the principles of physical metallurgy, three dimensional physical metallurgy information (volume fraction of γ' phase V_f , lattice misfit δ , diffusion coefficient D_L) are added to the original dataset as extra dimensions to guide the training process. Additionally, the correlation analysis and importance evaluation of the original data features are made based on the Pearson correlation coefficient and the mean accuracy decrease (MDA) value of a random forest model respectively. As a result, the dataset is basically consistent with the physical metallurgy mechanism, and the three-dimensional physical metallurgy information is of great significance for the creep life prediction. The creep life of the alloy is predicted on the dataset after data mining based on the machine learning method, and different machine learning models are evaluated according to the squared correlation coefficient (R^2), mean absolute error (MAE) and the degree of overfitting. Finally, the optimal model is determined as support vector regression (SVR) model. The relationship between the composition, process, physical metallurgical parameters and creep rupture life of Ni-based single crystal superalloy under high temperature and low stress is successfully established, which can effectively predict the creep life and is expected to serve the reverse design of the alloy.

Key words: Ni-based single crystal superalloy; machine learning; creep life; high temperature and low stress

1 前言

镍基单晶高温合金作为航空发动机涡轮叶片的关键材料,具备优异的承温性能和抗蠕变性能^[1]。然而在抗蠕变性能的研究中,讨论最多的是高温低应力条件下的蠕变,这与镍基单晶高温合金涡轮叶片在实际应用中的情况相契合^[2,3]。因此,提高新一代镍基单晶高温合金在高温和低应力下的蠕变寿命是合金设计的主要目标之一。

镍基单晶高温合金由于涉及大量昂贵的金属元素、单晶制造技术成本高、蠕变试验周期长,同时缺乏成分、组织和性能之间的定量关系,通过传统的试错法来提高合金的蠕变抗力需要耗费大量的时间和成本。因此,如何加速预测镍基单晶高温合金的蠕变寿命具有重要意义。传统预测蠕变寿命的方法主要分为外推法和蠕变本构模型两种。外推法一般根据短期数据寻求经验公式,用以计算外推长期结果,或者是根据高温蠕变与蠕变断裂的微观过程,建立起温度、应力、蠕变速率或蠕变断裂时间之间的关系式^[4,5]。但是这种方法没有充分考虑实际蠕变过程中的显微组织演化信息,缺乏严谨的理论基础。蠕变本构模型则是基于蠕变过程中的组织演化信息,从微观角度出发建模预测合金的蠕变行为。Zhu等^[6]通过考虑析出物的形态、尺寸和间距等几何结构因素,认为蠕变速率取决于 γ/γ' 界面处位错的滑移和攀移以及从俘获组态中逃逸的速率,提出了一种对化学成分和显微组织敏感的镍基单晶高温合金蠕变变形行为模型。Reed等^[7,8]则是考虑高温下的位错攀移绕过蠕变机制,基于控制位错蠕变和空位辅助扩散的原子尺度过程的预期相似性,通过计算有效扩散系数来评估合金的蠕变抗力。Kim等^[9]通过对已有模型的修正和组合,描述了将理论模型与相图计算(CALPHAD)方法相结合的高通量计算,建立了基于组织、工艺和蠕变条件以及材料性能的数学模型,并将该模型用于预测镍基高温合金中温区蠕变性能。虽然相关学者已经对如何加速预测镍基单晶高温合

金的蠕变寿命进行了大量的研究,这些理论方法能够准确地描述合金的蠕变过程,并能在较短的时间内成功地预测合金的蠕变断裂寿命,但是由于镍基单晶高温合金的蠕变过程涉及长时间的显微组织演化,并且在不同温度应力下蠕变机制有所不同。因此想要进一步提升模型的准确性和适用性是非常困难的。

近年来,随着人工智能的快速发展,机器学习算法在建立高通量数据关联方面具有极大的优越性,已被越来越多地应用于材料性能的预测。Han等^[10]基于从文献中收集的小数据集,通过数据驱动的机器学习方法,开发了一种基于双模型联动的方法来预测合金的蠕变寿命。基于高精度模型来判断和调整低精度模型,最终成功改善了整体蠕变寿命预测的精度。然而该方法仅考虑了成分参数和测试条件,并没有进一步考虑工艺参数和物理冶金参数对镍基单晶高温合金蠕变寿命的影响,缺乏可解释性。Liu等^[11]在考虑化学成分、测试温度、测试应力和热处理工艺的基础上,同时基于相图计算方法和各种基本材料结构-性质关系计算并引入了层错能、晶格参数、 γ' 相的摩尔分数、扩散系数和剪切模量5个物理冶金参数,基于聚类方法区分混合蠕变机制,为每个类别训练出一个最优模型,大大提高了机器学习模型的预测能力。但是需要指出的是,该方法虽然能够区分不同的蠕变机制并分别建立机器学习模型,但对于不同蠕变条件的形变机制(如图1所示),此工作并未考虑引入不同的物理冶金参数来指导机器学习模型,如层错能和剪切模量对应中低温蠕变机制^[12,13]并不适用于高温蠕变机制,这可能会恶化基于单一蠕变机制建立的机器学习模型的预测准确性和可解释性。

综上所述,人工智能分析策略对于高温合金材料蠕变性能的预测颇有成效,但是目前所建立的机器学习模型没有考虑符合高温低应力蠕变机制的物理冶金参数,不能够对高温低应力条件下镍基单晶高温合金的蠕变性能实现准确预测。对此,本文的研究目的在于通过人工

智能算法,建立起高温低应力下镍基单晶高温合金成分、工艺以及引入的物理冶金参数和蠕变寿命之间的关系,

最终能够有效地预测蠕变寿命,有望应用于合金成分工艺的反向设计。

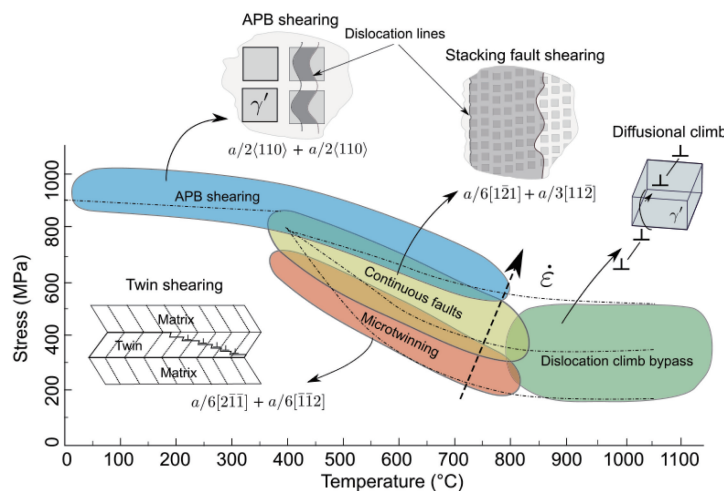


图 1 单晶高温合金在不同服役温度及应力范围内的蠕变变形机制示意图^[12, 13]

Fig. 1 Deformation map for a single crystal superalloy illustrating the dependence on stress, temperature and strain rate^[12, 13]

2 实验方法

2.1 数据库的建立

本数据库的文献信息部分来源于 Liu 等^[11]的研究,基于数据质量分析保留 122 条高温低应力下的蠕变数据。此外基于文献调研^[14-37],收集镍基单晶高温合金的蠕变数据合计 110 条。最终建立了较高质量的镍基单晶合金蠕变数据集(成分/工艺/测试条件-蠕变寿命)。

如表 1 所示,数据集中包括 23 个输入特征和 1 个输出特征(蠕变寿命)。数据集的输入特征,综合考虑了材料特性和环境因素。材料特性包括 15 个元素(Ni, Cr, Mo, W, Co, Re, Ru, Al, Ti, Ta, Hf, C, B, Nb, Y)含量特征和 6 个工艺参数(固溶温度(ST)和时间(St)、一次时效温度(1aT)和时间(1at)、二次时效温度(2aT)和时间(2at))。环境因素则包括与蠕变过程密切相关的蠕变温度(tT)和蠕变应力(tS)。

2.2 物理冶金参数的引入

对于基于机器学习回归策略的性能预测,引入物理冶金变量可以有效地提高泛化能力,而对于设计过程,可以消除不符合物理冶金原则的中间解,从而提高设计的精度和效率^[38]。由于镍基单晶高温合金在高温和低应力下,热激活攀移绕过是主要的变形机制,此时的蠕变变形主要来自于位错在 γ 基体相中的滑移和沿 γ/γ' 界面的攀移,与筏状结构的形成有关。因此基于这一蠕变机制,对于镍基单晶高温合金的抗蠕变性能预测,最终考虑引入以下微观结构参数作为模型输入: γ' 相体积分数 V_f , 晶格错配度 δ , 扩散系数 D_L , 如表 2 所示。

γ' 相作为镍基单晶高温合金的主要强化相,其数量、形态、尺寸和分布与合金的力学性能以及蠕变性能是密切相关的^[39]。本工作中基于 CALPHAD 方法中的 Thermo-Calc 来计算获得服役温度下的 γ' 相体积分数,作为模型的输入。

在高温合金中, γ 和 γ' 相间的晶格错配度会对界面处位错网络的密度和演化速率以及蠕变断裂寿命产生重要的影响^[40, 41]。考虑到计算获得服役温度下晶格参数的公式过于依赖经验,因此在本研究中只采取室温下的晶格错配度^[42]作为输入,如式(1)~式(3):

$$\delta = \frac{2(a_{\gamma'}^{\text{RT}} - a_{\gamma}^{\text{RT}})}{a_{\gamma'}^{\text{RT}} + a_{\gamma}^{\text{RT}}} \quad (1)$$

$$a_{\gamma}^{\text{RT}} = 3.524 + 0.0196x_{\text{Co}}^{\gamma} + 0.110x_{\text{Cr}}^{\gamma} + 0.478x_{\text{Mo}}^{\gamma} + 0.444x_{\text{W}}^{\gamma} + 0.441x_{\text{Re}}^{\gamma} + 0.3125x_{\text{Ru}}^{\gamma} + 0.179x_{\text{Al}}^{\gamma} + 0.422x_{\text{Ti}}^{\gamma} + 0.7x_{\text{Ta}}^{\gamma} \quad (2)$$

$$a_{\gamma'}^{\text{RT}} = 3.57 - 0.004x_{\text{Cr}}^{\gamma'} + 0.208x_{\text{Mo}}^{\gamma'} + 0.194x_{\text{W}}^{\gamma'} + 0.262x_{\text{Re}}^{\gamma'} + 0.1335x_{\text{Ru}}^{\gamma'} + 0.258x_{\text{Ti}}^{\gamma'} + 0.5x_{\text{Ta}}^{\gamma'} \quad (3)$$

式中, a_{γ}^{RT} 和 $a_{\gamma'}^{\text{RT}}$ 分别代表室温下 γ 基体相和 γ' 强化相的晶格参数; γ 相和 γ' 相中元素的原子数分数 $x_i^{\gamma/\gamma'}$ 来源于 Thermo-Calc 计算。

在高温低应力下,原子扩散机制是合金发生蠕变变形的重要原因之一,原子的扩散会影响蠕变发生的速率、 γ' 相的粗化以及扩散控制的氧化速率。在 Zhu 等^[6]的研究中将 γ 相的晶格扩散系数作为其高温蠕变模型中的有效扩散系数,这其实是一种简化计算扩散系数的方法,特别是对扩散系数以复杂基体形式存在的多元体系的镍

基单晶高温合金而言。通过进一步数学上的推导简化，
本研究中采取式(4)进行扩散系数的计算：

$$D_L = \sum_i x_i D_i^{\text{Ni}} \quad (4)$$

式中， x_i 表示 γ 基体相中元素 i 的摩尔分数； D_i^{Ni} 表示元素 i 在 Ni 中的扩散系数， x_i 和 D_i^{Ni} 均基于 Thermo-Calc 计算获得。

表 1 镍基单晶高温合金蠕变数据特征的基本信息

Table 1 Basic information of the features in the creep dataset of Ni-based single crystal superalloy

	Features	Minimum	Maximum	Mean	Standard deviation
Inputs	Ni/wt%	52.1	77.05	63.645 23	4.022 386
	Cr/wt%	0	10	5.109 612	2.263 633
	Mo/wt%	0	9.57	1.816 466	2.076 53
	W/wt%	0	9	4.528 276	2.478 987
	Co/wt%	0	15	7.504 871	2.895 328
	Re/wt%	0	7.5	3.588 621	1.747 433
	Ru/wt%	0	9.6	0.483 448	1.422 568
	Al/wt%	4	7	5.856 767	0.442 416
	Ti/wt%	0	3.92	0.458 836	0.743 134
	Ta/wt%	3.9	12	6.814 267	1.381 653
	Hf/wt%	0	0.51	0.114 655	0.086 716
	C/wt%	0	0.05	0.011 239	0.018 471
	B/wt%	0	0.05	0.008 815	0.017 004
	Nb/wt%	0	0.55	0.0525	0.136 046
	Y/wt%	0	0.05	0.006 393	0.010 118
	tT/°C	850	1180	1042.262	76.399 94
	tS/MPa	70	500	200.538	96.568 81
	St/h	2	24	9.676 724	8.500 191
	1at/h	1.5	8	4.101 293	0.759 621
	2at/h	0	32	18.853 45	5.220 573
Outputs	ST/°C	1255	1365	1315.707	21.590 68
	1aT/°C	1000	1200	1114.812	45.189 74
	2aT/°C	0	900	857.4373	119.9242
	Creep life/h	1	3917	413.6501	750.8796
	ln(life)	0	8.273 081	5.020 117	1.431 232

表 2 基于 Thermo-Calc 计算引入的三维物理冶金信息

Table 2 Three-dimensional physical metallurgical information based on Thermo-Calc calculation

	Features	Minimum	Maximum	Mean	Standard deviation
Inputs II	V_f	0.218 62	0.780 83	0.532 466	0.112 432
	δ	-0.0051	0.007 611	0.001 933	0.002 045
	D_L	4.85E-25	3.5E-10	4.02E-12	3.31E-11

2.3 建模过程

本研究基于人工智能策略建立蠕变寿命的最优预测

模型的基本流程如图 2 所示。在建立了数据库并且引入了物理冶金参数之后，首先对数据进行预处理，基于归

一化处理将原始的数据特征去量纲化并缩放至相同的尺度, 如式(5)所示:

$$X_{\text{scale}} = \frac{X - X_{\min}}{X_{\max} - X_{\min}} \quad (5)$$

基于 Pearson 系数和随机森林平均精确度降低 (MDA) 值等数据关联性分析方法评估数据特征之间的关联性以及重要性。选择 7 种经典的机器学习算法建立性能预测模型, 包括线性回归 (LR)、支持向量回归 (SVR)、多层感知机 (MLP)、随机森林 (RF)、梯度提升回归 (GBR)、极端梯度提升回归 (XGB) 和自适应提升回归 (AdB) 模型, 训练模型之前需要将数据集按照 8:2 的比例划分为训练

集和测试集, 建模过程中基于网格搜索法调参, 训练并优化机器学习模型。最后基于平方相关系数 (R^2) 和平均绝对误差 (MAE) 评估模型性能, 分别如式 (6) 和式 (7) 所示:

$$R^2 = \frac{\left(n \sum_{i=1}^n f(x_i) y_i - \sum_{i=1}^n f(x_i) \sum_{i=1}^n f(y_i) \right)^2}{\left(n \sum_{i=1}^n f(x_i)^2 - \left(\sum_{i=1}^n f(x_i) \right)^2 \right) \left(n \sum_{i=1}^n y_i^2 - \left(\sum_{i=1}^n y_i \right)^2 \right)} \quad (6)$$

$$\text{MAE} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n |f(x_i) - y_i| \quad (7)$$

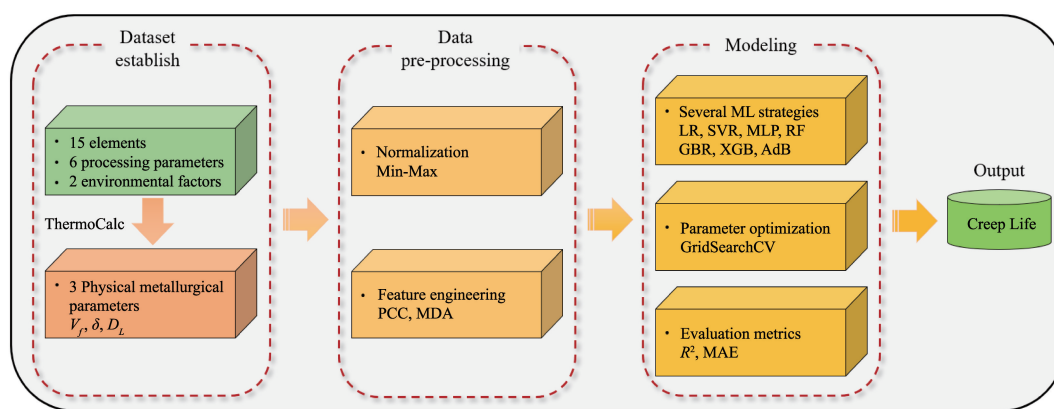


图 2 蠕变寿命最优预测模型建立的基本流程

Fig. 2 The basic flow of establishing the optimal prediction model of creep life

3 结果和讨论

3.1 特征分析

对数据集进行了 Pearson 系数相关性分析 (如图 3 所示): 任意两个特征之间 Pearson 系数的绝对值均小于 1, 这说明所有的特征均可以视为独立变量。每个特征相对

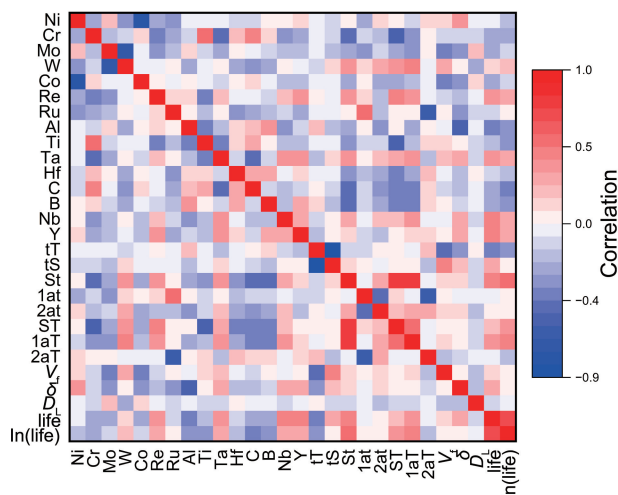


图 3 Pearson 系数热力图

Fig. 3 Heat map of the Pearson correlation coefficient

于输出变量的 Pearson 系数的绝对值均大于 0, 这意味着每个特征对于蠕变寿命都有自己的贡献。因此, 单独分析各特征对蠕变寿命的重要性是合理的。

图 4a 定量地显示了基于平均精确度降低值评估的每个特征对蠕变寿命预测的重要性。值得注意的是, 引入的 3 个物理冶金变量 V_f 、 δ 、 D_L 的重要性均位于前列, 这意味着本研究中引入的 3 个物理冶金参数对于镍基单晶高温合金蠕变寿命的预测有着重要意义, 同时这与高温低应力下位错攀移绕过机制基本吻合, 表明本研究所建立的数据集基本符合物理冶金原理。二次时效温度的平均精确度降低值较高, 这意味着所收集数据的热处理工艺中二次时效温度极大地影响着合金的蠕变寿命, 根据传统的物理冶金理论, 二次时效过程影响着 γ' 相的形貌和尺寸, 进而影响着 γ 基体相和 γ' 相的晶格错配度, 是影响蠕变过程中 γ' 相能否定向粗化 (筏化) 的关键因素。此外, 测试条件和测试应力的平均精确度降低值位于前列, 这说明环境因素对合金蠕变寿命的影响较为重要。同时可以看到 γ 基体相元素 Ni、 γ' 相形成元素 Al 和 Ta 以及固溶强化元素 Cr 和 Re 的平均精确度降低值均位于前列, 这说明所建立的数据集中成分特征影响同样显

著, 因为蠕变过程时间较长, 涉及显微组织的演化, 这与合金元素的扩散过程密切相关, 这进一步证明了本研究中所使用的数据集具有一定的可信度和可解释性。

平均精确度降低值低估了 Ru 元素对蠕变寿命的贡献, 这是因为作为最新一代镍基单晶高温合金, 所能收集到的数据中含 Ru 元素的样本仅有 32 个。不可否认的是 Ru 元素的添加会抑制拓扑密排(TCP)相的析出但同时增加了成本, 因此不少学者^[18, 19, 26]致力于追寻调控其他固溶强化元素如 Co, Mo 和 Cr 的含量来降低或者替代 Ru

元素以期降低成本, 这意味着基于所建立的数据集通过机器学习算法有希望为高性能低 Ru 或无 Ru 单晶高温合金成分工艺的反向设计服务。

不难发现, 平均精确度降低值高估了 Y 元素的贡献, 因此后续基于 Y 元素的有无将数据集分成了两类, 评估了有 Y 元素数据集中的特征重要性。如图 4b 所示, 含有 Y 元素的数据集中 Y 元素的特征重要性评估排名非常靠后, 这也就表明高估 Y 元素的原因是数据集中 Y 元素分布不均匀。

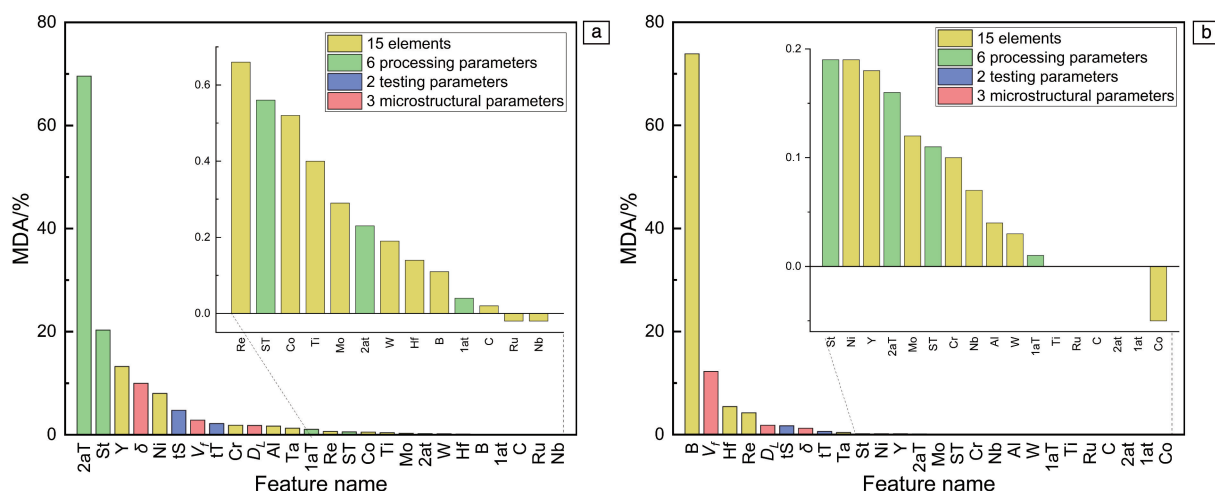


图4 特征重要性评估结果: (a) 原始数据特征平均精确度降低(MDA)值, (b) 含有Y元素数据集中的MDA值
Fig. 4 Feature importance evaluation results: (a) the mean decrease accuracy (MDA) value of original data feature, (b) the MDA value of each feature in the dataset containing Y element

3.2 机器学习算法的选择

在建立稳定的蠕变预测模型之前, 将归一化后的数据全部打乱并进行随机划分, 将其中的 80% 用作训练集, 余下的 20% 用作测试集, 共进行了 100 次计算。通过评估 100 次随机划分训练后的 R^2 和平均绝对误差, 对各种机器学习模型的性能进行了比较分析, 图 5 显示了这些

模型的 R^2 和平均绝对误差。

从图 5a 中可以发现, LR 模型和 AdB 模型训练集和测试集的 R^2 值相对较低, 而大多数其他模型的 R^2 表现远远好于 LR 和 AdB 模型。值得注意的是, 虽然 RF 模型的训练集具有较高的 R^2 值(95%以上), 但是在测试集上表现确不尽人意(80%以下), 这意味着 RF 在本研究中

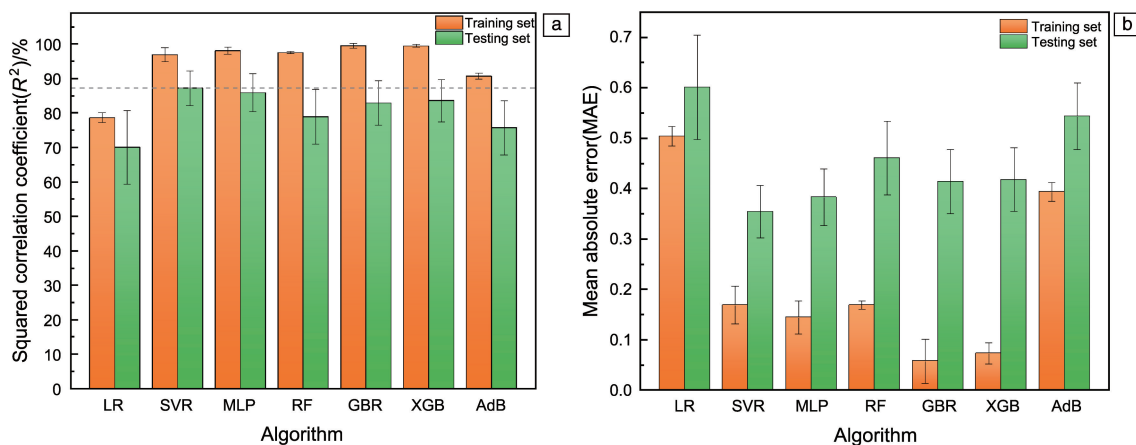


图5 不同机器学习算法的评估结果: (a) 平方相关系数, (b) 平均绝对误差

Fig. 5 Evaluation results of different machine learning algorithms: (a) squared correlation coefficient (R^2), (b) mean absolute error (MAE)

具有很强的过拟合趋势。这也表明具有 26 个输入特征的蠕变寿命预测是一个比较复杂的问题,远远超出了 RF 模型的最大分析能力。同样地,SVR 模型、MLP 模型、GBR 模型和 XGB 模型 4 种机器学习算法在训练集上均有良好的表现, R^2 均在 95% 以上;然而在测试集上并没有保持这种优异的性能, R^2 的值集中在 80%~90% 之间。SVR 模型在训练集上的 R^2 达到了 96.88%;在测试集上的 R^2 相对较高,达到了 87.17%,并且拥有较窄的误差范围。这意味着与其他模型相比,SVR 模型更加稳定,过拟合的风险更低。这一结论也可以从平均绝对误差结果中得到证明,如图 5b 所示,SVR 模型在训练集和测试集上的平均绝对误差值分别为 0.1689 和 0.3542,并且误差范围相对较窄。

由于在小样本问题上,机器学习模型的过度拟合是一个重要的风险。因此,为了进一步评估 SVR、MLP、GBR 和 XGB 这 4 种算法的性能,需要对模型的过拟合程度进行评估分析,图 6 给出了在 100 次随机划分训练后,训练集和测试集 R^2 差在 10%~20%、20%~30% 和 >30% 范围内,SVR、MLP、GBR 和 XGB 这 4 种算法的过拟合模型的确切个数。由图 6 可以清晰地看到,相比 MLP、GBR 和 XGB 算法,SVR 算法的过拟合模型的个数是最少的,这意味着 SVR 模型拥有最小的过拟合风险。因此,最终选择 SVR 作为镍基单晶高温合金高温低应力条件下蠕变寿命预测的模型。

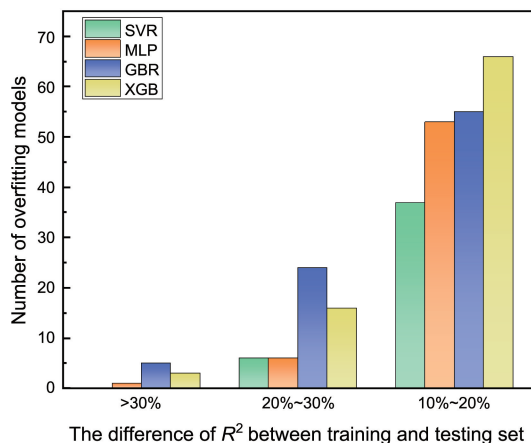


图 6 过拟合程度分析

Fig. 6 The number of overfitting models

3.3 蠕变寿命的预测结果与合理性分析

由于对数据集进行了 100 次不同的随机划分,因此每个样本都能够多次被划分至训练集和测试集中,也就是说每个样本均可以获得多个预测。图 7 显示了 SVR 在不同数据集上的蠕变寿命平均预测结果。如图 7a 所示,SVR 模型在训练集中表现为几乎所有的数据点都落在了

斜率为 1 的直线上,误差棒也比较小,这一结果证明 SVR 模型在各自的训练集中都有着优异的性能。如图 7b 所示,在测试集中,SVR 模型的表现不如在训练集中稳定,少量数据偏离了这条线,并显示出较大的误差条,这说明本研究中所使用的 SVR 模型对数据集的划分存在一定的敏感性。

为了进一步验证 SVR 模型的预测效果,基于文献调研,收集 25 个新数据,蠕变寿命范围为 25.985~1364 h,与高温低应力这一蠕变机制基本吻合(其测试温度范围为 900~1140 °C,测试应力范围为 124~392 MPa)^[43~45]。图 7c 为 SVR 模型预测结果,其 R^2 为 84.44%,平均绝对误差值为 0.3568。相比于测试集,SVR 模型预测精度虽然出现一定程度的下降,但综合来看仍在可接受范围内,这也证明了基于物理冶金指导 SVR 模型具有良好的鲁棒性和可拓展性。

3.4 物理冶金参数的作用效果分析

为了进一步明确物理冶金参数在计算中所起到的作用,分别建立了不同层次的蠕变数据集(即原始特征+ γ' 相体积分数 $V_{\gamma'}$ 、原始特征+晶格错配度 δ 、原始特征+扩散系数 D_L 以及原始特征+两两组合的物理冶金参数)对 SVR 模型进行训练和测试。其中,数据集 100 次随机划分下,SVR 模型在测试集上的平均绝对误差如图 8 所示。

当模型的输入仅为成分工艺和测试条件时,SVR 模型表现最差,而当使用原始特征和不同物理冶金参数作为输入时,模型的性能得到了一定提升。值得注意的是,在所有的模型中,模型 SVR+ $V_{\gamma'}+\delta$ 与模型 SVR+ALL 的预测效果最好且相近,但是后者的平均绝对误差值更低同时 R^2 和平均绝对误差的标准偏差更小,依此可以说明 SVR+ALL 拥有最好的预测效果。这进一步说明了在物理冶金原理的指导下对原始数据进行挖掘的重要性:物理冶金参数的引入不仅改善了机器学习模型的预测精度,同时可以改善模型的鲁棒性。

4 结 论

本文在充分调研国内外加速镍基单晶高温合金蠕变寿命预测的研究基础上,基于文献调研,建立起了高温低应力下的单晶高质量蠕变数据集,并且基于镍基单晶高温合金高温低应力下的蠕变机制,引入了三维物理冶金信息: γ' 相体积分数 $V_{\gamma'}$,晶格错配度 δ ,扩散系数 D_L 。通过基于物理冶金指导机器学习的方法预测了高温低应力下镍基单晶高温合金的蠕变寿命,并且通过平方相关系数(R^2)、平均绝对误差(MAE)、过拟合程度等方面对机器学习模型性能进行了评估,分析了物理冶金参数的作用效果。主要研究结论如下:

(1) 基于 Pearson 系数的特征相关性分析表明,数据

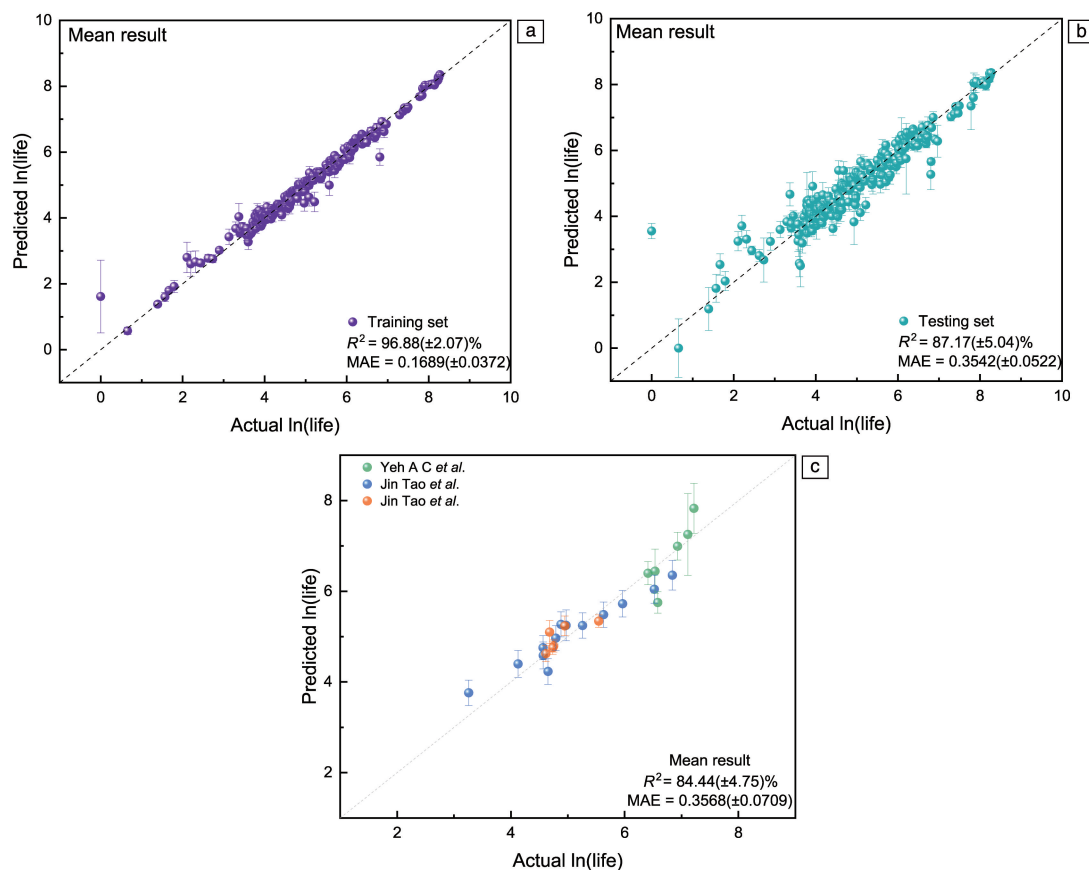


图7 蠕变寿命预测结果: (a) SVR 在训练集上的表现, (b) SVR 在测试集上的表现, (c) SVR 在少量新数据上的表现

Fig. 7 Creep life prediction results: (a) performance of the SVR model on the training set, (b) performance of the SVR model on the testing set, (c) performance of SVR model on a small amount of new data

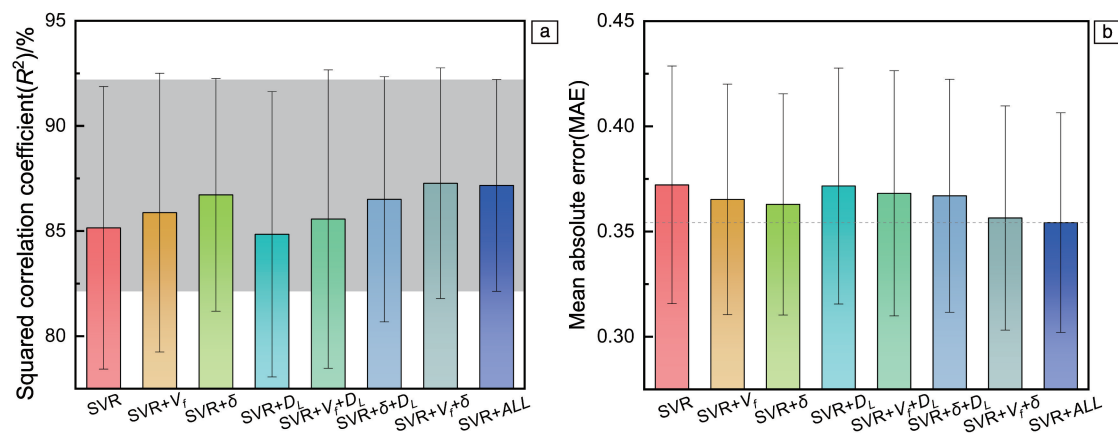


图8 基于不同程度数据挖掘的SVR模型在测试集上的表现: (a) R^2 , (b) 平均绝对误差

Fig. 8 Performance of SVR model based on different levels of data mining on the testing set: (a) R^2 , (b) MAE

集中的每个特征对蠕变寿命都有着自己的贡献;同时基于随机森林平均精确度降低的特征重要性评估表明,本研究中所使用的数据集在物理冶金学原理上存在一定合理性。

(2) 基于7种经典的机器学习算法预测了合金的蠕变寿命,其中支持向量回归(SVR)模型的预测效果最佳,

在训练集上的平方相关系数为96.88%,平均绝对误差值为0.1689;而在测试集上的平方相关系数为87.17%,平均绝对误差值为0.3542,并且拥有最少的过拟合模型个数。

(3) 在引入三维物理冶金信息后,获得最高的平方相关系数和最小的平均绝对误差,同时降低了平方相关系数

和平均绝对误差的标准偏差,说明物理冶金参数的引入改善了原始数据的质量,提高了 SVR 模型的预测准确性以及泛化能力。

参考文献 References

- [1] REED R C. The Superalloys: Fundamentals and Applications[M]. London: Cambridge University Press, 2008.
- [2] XIA W, ZHAO X, YUE L, *et al.* Journal of Alloys and Compounds[J], 2020, 819: 152954.
- [3] CARON P, KHAN T. Aerospace Science and Technology[J], 1999, 3(8): 513–523.
- [4] LARSON F R, MILLER J. Transactions of the American Society of Mechanical Engineers[J], 1952, 74(5): 765–771.
- [5] DANG Y Y, ZHAO X B, YUAN Y, *et al.* Materials at High Temperatures[J], 2016, 33(1): 1–5.
- [6] ZHU Z, BASOALTO H, WARNKEN N, *et al.* Acta Materialia[J], 2012, 60(12): 4888–4900.
- [7] REED R C, ZHU Z, SATO A, *et al.* Materials Science and Engineering: A[J], 2016, 667: 261–278.
- [8] REED R C, TAO T, WARNKEN N. Acta Materialia[J], 2009, 57(19): 5898–5913.
- [9] KIM Y K, KIM D, KIM H K, *et al.* International Journal of Plasticity[J], 2016, 79: 153–175.
- [10] HAN H, LI W, ANTONOV S, *et al.* Computational Materials Science[J], 2022, 205: 111229.
- [11] LIU Y, WU J, WANG Z, *et al.* Acta Materialia[J], 2020, 195: 454–467.
- [12] SMITH T M, UNOCIC R R, DEUTCHMAN H, *et al.* Materials at High Temperatures[J], 2016, 33(4/5): 372–383.
- [13] BARBA D, ALABORT E, PEDRAZZINI S, *et al.* Acta Materialia[J], 2017, 135: 314–329.
- [14] YEH A C, TIN S. Metallurgical and Materials Transactions A[J], 2006, 37(9): 2621–2631.
- [15] LU F, LI L, ANTONOV S, *et al.* Effect of Re on Long-Term Creep Behavior of Nickel-Based Single-Crystal Superalloys for Industrial Gas Turbine Applications[C]//Proceedings of Superalloys 2020. Cham: Springer, 2020: 218–227.
- [16] TAN X P, LIU J L, JIN T, *et al.* Materials Science and Engineering: A[J], 2013, 580: 21–35.
- [17] CARROLL L J, FENG Q, POLLOCK T M. Metallurgical and Materials Transactions A[J], 2008, 39(6): 1290–1307.
- [18] HUO J J, SHI Q Y, FENG Q. Materials Science and Engineering: A[J], 2017, 693: 136–144.
- [19] SHI Q, HUO J, ZHENG Y, *et al.* Materials Science and Engineering: A[J], 2018, 725: 148–159.
- [20] CHEN J, QIANG F, CAO L, *et al.* Progress in Natural Science: Materials International[J], 2010, 20: 61–69.
- [21] CHEN J Y, LI Q, ZHANG M J, *et al.* Influences of W and Al on the Microstructure and Stress-Rupture Property of Re-Free Ni-Based Single Crystal Superalloys[C]//Proceedings of Materials Science Forum. Switzerland: Trans Tech Publications Ltd, 2017, 898: 492–497.
- [22] CHEN J Y, CAO L M, XUE M, *et al.* Rare Metals[J], 2014, 33(2): 144–148.
- [23] SONG W, WANG X, LI J, *et al.* Journal of Materials Science & Technology[J], 2021, 89: 16–23.
- [24] SONG W, WANG X G, LI J G, *et al.* Materials Science and Engineering: A[J], 2020, 772: 138646.
- [25] YEH A C, RAE C M F, TIN S. Superalloys[J], 2004: 677–685.
- [26] WANG W Z, JIN T, JIA J H, *et al.* Materials Science and Engineering: A[J], 2015, 624: 220–228.
- [27] CHEN J, HUO Q, CHEN J, *et al.* Materials Science and Engineering: A[J], 2021, 799: 140163.
- [28] ZHANG J X, MURAKUMO T, KOIZUMI Y, *et al.* Journal of Materials Science[J], 2003, 38(24): 4883–4888.
- [29] ZHANG J X, KOIZUMI Y, KOBAYASHI T, *et al.* Metallurgical and Materials Transactions A[J], 2004, 35(6): 1911.
- [30] SIMONETTI M, CARON P. Materials Science and Engineering: A[J], 1998, 254(1/2): 1–12.
- [31] DING Q, BEI H, LI L, *et al.* International Journal of Mechanical System Dynamics[J], 2021, 1(1): 121–131.
- [32] ZHAO Y S, ZHANG J, LUO Y S, *et al.* Materials Science and Engineering: A[J], 2016, 672: 143–152.
- [33] LIU Y F, SHA J B, ZHAO Y S, *et al.* Rare Metals[J], 2018: 1–7.
- [34] RU Y, ZHANG H, PEI Y, *et al.* Materialia[J], 2019, 6: 100278.
- [35] HAN Y F, MA W Y, DONG Z Q, *et al.* Effect of Ruthenium on Microstructure and Stress Rupture Properties of a Single Crystal Nickel-Base Superalloy[C]//Superalloys 2008: Proceedings of the 11th International Symposium on Superalloys. Warrendale: Minerals Metals & Materials Society, 2008: 91–97.
- [36] YUE Q, LIU L, YANG W, *et al.* Materials Science and Engineering: A[J], 2019, 742: 132–137.
- [37] MACKAY R A, GABB T P, NATHAL M V. Materials Science and Engineering: A[J], 2013, 582: 397–408.
- [38] SHEN C, WANG C, WEI X, *et al.* Acta Materialia[J], 2019, 179: 201–214.
- [39] MURAKUMO T, KOBAYASHI T, KOIZUMI Y, *et al.* Acta Materialia[J], 2004, 52(12): 3737–3744.
- [40] VAN SLUYTMAN J S, POLLOCK T M. Acta Materialia[J], 2012, 60(4): 1771–1783.
- [41] VOLEK A, PYCZAK F, SINGER R F, *et al.* Scripta Materialia[J], 2005, 52(2): 141–145.
- [42] RETTIG R, RITTER N C, HELMER H E, *et al.* Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering[J], 2015, 23(3): 035004.
- [43] YEH A C, SATO A, KOBAYASHI T, *et al.* Materials Science and Engineering: A[J], 2008, 490(1/2): 445–451.
- [44] 金涛. 一种无铼第二代镍基单晶高温合金: CN200610046891[P]. 2009–02–11.

JIN T. Non-Rhenium No.2 Generating Nickel-Base Mono High Temp Alloy: CN200610046891[P]. 2009-02-11.

[45] 金涛. 一种高强度且组织稳定的第四代单晶高温合金及制备方法: CN103382536[P]. 2013-11-06.

JIN T. Fourth-Generation Single-Crystal High Temperature Alloy with High Strength and Stable Structure and Preparation Method Thereof: CN103382536[P]. 2013-11-06.

(编辑 吴 锐)



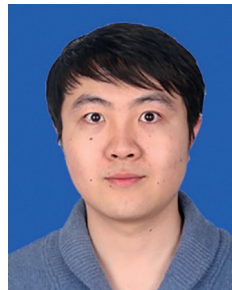
特约撰稿人刘晓明



特约撰稿人汪 欣



特约撰稿人刘艳明



特约撰稿人王晨充



特约撰稿人于 皓

刘晓明:女, 1986年生, 东北大学副教授、博士生导师。2017年于清华大学获博士学位。美国西北大学、纽约州立大学布法罗分校访问学者。研究方向为冶金与材料过程电磁场应用的人工设计与智能调控。在 *Scripta Materialia*, *Journal of Materials Science & Technology*, *Applied Physics Letters* 等期刊发表文章 30 余篇。作为负责人承担国家级项目 4 项, 校企合作项目 5 项, 科技成果应用转化累计 1200 余万元。荣获 IFAM 优秀青年科学家奖、荣程青科研创新奖、第五届中国大学生材料热处理创新创业大赛一等奖优秀指导教师、第十六届全国大学生节能减排社会实践与科技竞赛一等奖优秀指导教师等奖励和荣誉称号。

汪 欣:男, 1987年, 工学博士, 正高级工程

师, 硕士生导师, 现任西北有色金属研究院腐蚀与防护研究所所长助理。陕西省“高层次人才特殊支持计划”青年拔尖人才, 陕西省青年科技新星, 西安市地方级领军人才(二类)。担任中国腐蚀与防护学会高温专业委员会委员以及陕西省机械工程学会表面工程技术分会理事。主要从事金属的高温腐蚀与防护涂层研究。近年来主持和参加国家自然科学基金、国家重点研发计划、陕西省创新人才推进计划、陕西省自然科学基金基础研究计划面上项目以及横向技术研发项目等 22 项, 发表学术论文 29 篇, 获授权发明专利 14 项, 制定中国有色金属行业标准 1 项。获中国有色金属工业科学技术奖二等奖 1 项和中国航天科技科学技术进步奖三等奖 1 项。

刘艳明:女, 1988年

生, 西安石油大学副教授、硕士生导师。2015年于中国科学院金属研究所获博士学位, 长期从事金属材料表面改性及涂层技术方面的研究, 主要研究方向有: ① 硬质涂层的强化及摩擦磨损性能研究; ② 高性能陶瓷涂层、搪瓷涂层的制备及力学和抗高温氧化性能研究; ③ 油气管道、井下工具表面涂层的研发与抗腐蚀性能研究。目前主持国家自然科学基金青年基金项目 1 项、陕西省自然科学基金基础研究计划项目 2 项, 承担企业横向项目 10 余项。近年来, 先后在 *Surface and Coatings Technology*, *Journal of Alloys and Compounds*, *Journal of Materials Science & Technology* 等国内外期刊上发表学术论文 20 余篇, 获授权国家发明专利 6 项, 出版学术专著 1 部。担任《表面技

术》青年编委。

王晨充:男, 1988年生, 东北大学轧制技术及连轧自动化国家重点实验室副教授、博士生导师。主要研究方向为金属材料基因工程与组织性能设计; 聚焦“以物理冶金信息指导机器学习”的先进金属结构材料基因工程研究。通过成分与制备工艺的耦合设计, 形成从固态相变设计到合金性能设计, 乃至产线工艺优化的系统性的钢铁材料基因工程方法。先后主持国家自然科学基金的重大项目子课题、面上项目、青年基金、国际交流与合作项目、国家重点研发计划子课题等国家级项目 7 项, 主持企业横向项目 10 余项。近 5 年来, 共发表 SCI 论文 52 篇, 包括 *Acta Materialia* 等中国科学院一区期刊文章 17 篇, 单篇论文最

高引用率 107 次。曾获 2011 钢铁共性技术协同创新中心“青年新秀”称号。

于 皓:男, 1991年生, 东北大学轧制技术及连轧自动化国家重点实验室博士后。2012、2015 年分别获大连理工大学工学学士、硕士学位, 博士就读于荷兰代尔夫特理工大学航空工程学院。目前主要致力于开展具有自修复性能的新型镍基合金研发, 以及增材专用高性能镍基合金计算设计与机制验证。参与国家自然科学基金的联合重点、面上项目以及国家重点研发计划子课题等国家级项目, 作为负责人承担中央高校基本科研经费、重点实验室项目。近年来, 在 *JMST*, *STAM*, *MMTA* 等领域内顶级期刊发表 10 余篇学术论文。