

# 权 利 要 求 书

---

1. 一种氧化动力学指数计算方法，其特征在于，包括：

获取预先构建的氧化特征树，所述氧化特征树为二叉树，所述二叉树包括多个节点和节点边，所述节点包括根节点和至少两个端节点，所述节点边存储有合金特征值，所述合金特征值是对合金数据划分的边界；

从合金数据中依据合金特征数据划分所述节点，从所述根节点出发，根据所述合金特征数据与所述节点边上所述合金特征值的比较结果逐一确定目标节点边，直至到达所述端节点，将所述端节点确定为目标端节点；

将所述目标端节点中存储的所述氧化动力学指数作为所述合金数据的氧化动力学指数。

2. 根据权利要求1所述的氧化动力学指数计算方法，其特征在于，构建所述氧化特征树，包括：

获取氧化数据集；其中，所述氧化数据集包括多个合金样本，每个所述合金样本包括多个动力学特征和对应的动力学特征值；

基于所述氧化数据集执行动力学特征分化过程，构建所述氧化特征树；所述动力学特征分化过程包括：

构建父节点；所述父节点存储所述合金样本；所述父节点的初始值为所述根节点，所述根节点基于所述氧化特征集构建；

遍历所述父节点中所述合金样本的所述动力学特征和所述动力学特征值，从中选取目标动力学特征和目标动力学特征值；

根据所述目标动力学特征和所述目标动力学特征值，将所述父节点中所述合金样本进行拆分，得到所述父节点的第一子节点和第二子节点，并将所述目标动力学特征值存储于对应的所述节点边；

确定所述第一子节点和/或所述第二子节点未满足停止分化条件，将所述第一子节点和/或所述第二子节点作为所述父节点，执行所述动力学特征分化过程。

3. 根据权利要求2所述的氧化动力学指数计算方法，其特征在于，所述合金样本的所述动力学特征包括氧化时间和合金成分，所述合金样本还包括氧化增重；所述获取氧化数据集之后，还包括：

对所述氧化时间和所述氧化增重进行取对数预处理；

对所述合金成分进行组合计算，生成预设数量的二次合金特征；

将所述二次合金特征添加至所述氧化数据集。

4. 根据权利要求2所述的氧化动力学指数计算方法，其特征在于，所述遍历所述父节点中所述合金样本的所述动力学特征和所述动力学特征值，从中选取目标动力学特征和目标动力学特征值，包括：

从所述动力学特征中选取划分参数；所述划分参数包括候选特征和候选特征值，所述候选特征值从所述合金样本中所述候选特征的动力学特征值中选取得到；

根据所述候选特征值的数值大小将所述父节点中所述合金样本划分为第一候选集合和第二候选集合；

利用氧化动力学方程得到所述第一候选集合的第一拟合结果，以及所述第二候选集合的

第二拟合结果；

根据所述第一拟合结果的第一线性度值、所述第二拟合结果的第二线性度值和所述父节点的总线性度值计算得到所述划分参数的线性增益值；

遍历所述动力学特征值更新所述候选特征值，以及遍历所述动力学特征更新所述候选特征，根据所述线性增益值最大的所述划分参数得到所述目标动力学特征和所述目标动力学特征值。

5. 根据权利要求 4 所述的氧化动力学指数计算方法，其特征在于，所述根据第一拟合结果的第一线性度值、所述第二拟合结果的第二线性度值和所述父节点的总线性度值计算得到所述划分参数的线性增益值，包括：

根据所述第一拟合结果和所述第一候选集合中所述合金样本计算所述第一线性度值；

根据所述第二拟合结果和所述第二候选集合中所述合金样本计算所述第二线性度值；

获取所述父节点中所述合金样本的总样本数量，所述第一候选集合中所述合金样本的第一样本数量，所述第二候选集合中所述合金样本的第二样本数量；

根据所述第一样本数量和所述总样本数量计算第一样本比例，根据所述第二样本数量和所述总样本数量计算第二样本比例；

将所述第一样本比例和所述第一线性度值相乘得到第一线性度指标，将所述第二样本比例和所述第二线性度值相乘得到第二线性度指标；

将所述第一线性度指标和所述第二线性度指标相加并减去所述总线性度值，得到所述划分参数的线性增益值。

6. 根据权利要求 5 所述的氧化动力学指数计算方法，其特征在于，所述第一拟合结果为氧化动力学拟合方程，所述动力学特征值包括氧化时间值，所述合金样本还包括氧化增重值；所述根据所述第一拟合结果和所述第一候选集合中所述合金样本计算所述第一线性度值，包括：

将所述第一候选集合中合金样本的所述氧化时间值代入所述氧化动力学拟合方程，计算得到氧化增重拟合值；

计算所述氧化增重值和所述氧化增重拟合值的协方差得到第一中间结果；

计算所述氧化增重值的标准差得到第一标准差，计算所述氧化增重拟合值的标准差得到第二标准差，并将所述第一标准差和所述第二标准差相乘得到第二中间结果；

将所述第一中间结果除以所述第二中间结果，得到所述第一线性度值；

或者，

计算所述氧化增重值和所述氧化增重拟合值的误差平方和得到第三中间结果；

计算所述氧化增重值的总平方和得到第四中间结果；

将所述第三中间结果除以所述第四中间结果得到第五中间结果，将 1 减去所述第五中间结果得到所述第一线性度值。

7. 根据权利要求 2 所述的氧化动力学指数计算方法，其特征在于，所述根据所述目标动力学特征和所述目标动力学特征值，将所述父节点中所述合金样本进行拆分，得到所述父节点的第一子节点和第二子节点，包括：

根据所述目标动力学特征，比较所述父节点中所述合金样本对应的所述动力学特征值与所述目标动力学特征值的数值大小；

若所述动力学特征值小于或等于所述目标动力学特征值，则将所述合金样本划分至所述第一子节点；

若所述动力学特征值大于所述目标动力学特征值，则将所述合金样本划分至所述第二子节点。

8. 根据权利要求 2 所述的氧化动力学指数计算方法，其特征在于，所述停止分化条件包括线性度阈值和/或单一度阈值；所述方法还包括：

若所述第一子节点的第一线性度值满足所述线性度阈值，则将所述第一子节点作为所述端节点；

若所述第二子节点的第二线性度值满足所述线性度阈值，则将所述第二子节点作为所述端节点；

和/或，

若所述第一子节点中所述合金样本的氧化时间满足所述单一度阈值，则将所述第一子节点的所述父节点作为所述端节点；

若所述第二子节点中所述合金样本的氧化时间满足所述单一度阈值，则将所述第二子节点的所述父节点作为所述端节点。

9. 根据权利要求 1 至 8 中任一项所述的氧化动力学指数计算方法，其特征在于，所述端节点包括多个合金样本，利用氧化动力学方程得到所述合金样本的氧化动力学拟合方程，所述氧化动力学拟合方程包括所述氧化动力学指数；所述方法还包括：

将所述端节点的所述氧化动力学指数和所述合金样本输入至符号回归模型；

将所述氧化动力学指数作为回归目标，对所述合金样本中的所述动力学特征进行符号回归，得到所述氧化动力学指数的解析方程。

10. 一种氧化动力学指数计算装置，其特征在于，应用如权利要求 1 至 9 中任一项所述的氧化动力学指数计算方法，包括：

第一获取模块，用于获取预先构建的氧化特征树，所述氧化特征树为二叉树，所述二叉树包括多个节点和节点边，所述节点包括根节点和至少两个端节点，所述节点边存储有合金特征值，所述合金特征值是对合金数据划分的边界；

数据比较模块，用于从合金数据中依据合金特征数据划分所述节点，从所述根节点出发，根据所述合金特征数据与所述节点边上所述合金特征值的比较结果逐一确定目标节点边，直至到达所述端节点，将所述端节点确定为目标端节点；

指数获取模块，用于将所述目标端节点中存储的所述氧化动力学指数作为所述合金数据的氧化动力学指数。

11. 根据权利要求 10 所述的一种氧化动力学指数计算装置，其特征在于，还包括：

第二获取模块，用于获取氧化数据集；其中，所述氧化数据集包括多个合金样本，每个所述合金样本包括多个动力学特征和对应的动力学特征值；

分化模块，用于基于所述氧化数据集执行动力学特征分化过程，构建所述氧化特征树；所述动力学特征分化过程包括：

构建父节点；所述父节点存储所述合金样本；所述父节点的初始值为所述根节点，所述根节点基于所述氧化特征集构建；

遍历所述父节点中所述合金样本的所述动力学特征和所述动力学特征值，从中选取目标

动力学特征和目标动力学特征值；

根据所述目标动力学特征和所述目标动力学特征值，将所述父节点中所述合金样本进行拆分，得到所述父节点的第一子节点和第二子节点，并将所述目标动力学特征值存储于对应的所述节点边；

确定所述第一子节点和/或所述第二子节点未满足停止分化条件，将所述第一子节点和/或所述第二子节点作为所述父节点，执行所述动力学特征分化过程。

12. 根据权利要求 11 所述的一种氧化动力学指数计算装置，其特征在于，还包括：

解析模块，用于将所述端节点的所述氧化动力学指数和所述合金样本输入至符号回归模型；将所述氧化动力学指数作为回归目标，对所述合金样本中的所述动力学特征进行符号回归，得到所述氧化动力学指数的解析方程。

13. 一种电子设备，其特征在于，包括存储器、处理器，所述存储器存储有计算机程序，所述处理器执行所述计算机程序时实现如权利要求 1 至 9 中任一项所述的氧化动力学指数计算方法。

14. 一种计算机可读存储介质，其特征在于，所述存储介质存储有程序，所述程序被处理器执行实现如权利要求 1 至 9 中任一项所述的氧化动力学指数计算方法。

# 说明书

## 氧化动力学指数计算方法、装置、电子设备及存储介质

### 技术领域

本申请涉及合金技术领域，特别是涉及一种氧化动力学指数计算方法、装置、电子设备及存储介质。

### 背景技术

合金的氧化是一种重要的氧化反应过程，对材料的性能和寿命有着重要影响。了解合金氧化的动力学行为，即氧化过程中增重的速率和变化规律，对于耐氧化材料机理研究和耐氧化性设计等任务具有重要意义。通过建立氧化动力学方程可以更好地描述和预测合金的氧化增重过程，了解氧化反应的速率与时间、温度、压强等测试条件之间的关系。

氧化动力学指数是建立氧化动力学方程的重要参数之一，相关技术中的氧化动力学指数通常是一个固定值，用于描述特定合金在特定氧化条件下的氧化规律。然而这种方法无法研究氧化动力学指数本身与合金成分、测试条件之间的定量关系，也无法对多种合金在不同测试条件下的氧化特性进行全面描述。因此难以计算不同合金数据的氧化动力学指数和对应的氧化动力学方程，阻碍了相关研究的进一步发展。

### 发明内容

本申请旨在至少解决现有技术中存在的技术问题之一。为此，本申请实施例提供了一种氧化动力学指数计算方法、装置、电子设备及存储介质，能够针对不同的合金数据计算氧化动力学指数，促进相关研究发展。

第一方面，本申请实施例提供了一种氧化动力学指数计算方法，包括：

获取预先构建的氧化特征树，所述氧化特征树为二叉树，所述二叉树包括多个节点和节点边，所述节点包括根节点和至少两个端节点，所述节点边存储有合金特征值，所述合金特征值是对合金数据划分的边界；

从合金数据中依据合金特征数据划分所述节点，从所述根节点出发，根据所述合金特征数据与所述节点边上所述合金特征值的比较结果逐一确定目标节点边，直至到达所述端节点，将所述端节点确定为目标端节点；

将所述目标端节点中存储的所述氧化动力学指数作为所述合金数据的氧化动力学指数。

在本申请的一些实施例中，构建所述氧化特征树，包括：

获取氧化数据集；其中，所述氧化数据集包括多个合金样本，每个所述合金样本包括多个动力学特征和对应的动力学特征值；

基于所述氧化数据集执行动力学特征分化过程，构建所述氧化特征树；所述动力学特征分化过程包括：

构建父节点；所述父节点存储所述合金样本；所述父节点的初始值为所述根节点，所述根节点基于所述氧化特征集构建；

遍历所述父节点中所述合金样本的所述动力学特征和所述动力学特征值，从中选取目标

动力学特征和目标动力学特征值；

根据所述目标动力学特征和所述目标动力学特征值，将所述父节点中所述合金样本进行拆分，得到所述父节点的第一子节点和第二子节点，并将所述目标动力学特征值存储于对应的所述节点边；

确定所述第一子节点和/或所述第二子节点未满足停止分化条件，将所述第一子节点和/或所述第二子节点作为所述父节点，执行所述动力学特征分化过程。

在本申请的一些实施例中，所述合金样本的所述动力学特征包括氧化时间和合金成分，所述合金样本还包括氧化增重；所述获取氧化数据集之后，还包括：

对所述氧化时间和所述氧化增重进行取对数预处理；

对所述合金成分进行组合计算，生成预设数量的二次合金特征；

将所述二次合金特征添加至所述氧化数据集。

在本申请的一些实施例中，所述遍历所述父节点中所述合金样本的所述动力学特征和所述动力学特征值，从中选取目标动力学特征和目标动力学特征值，包括：

从所述动力学特征中选取划分参数；所述划分参数包括候选特征和候选特征值，所述候选特征值从所述合金样本中所述候选特征的所述动力学特征值中选取得到；

根据所述候选特征值的数值大小将所述父节点中所述合金样本划分为第一候选集合和第二候选集合；

利用氧化动力学方程得到所述第一候选集合的第一拟合结果，以及所述第二候选集合的第二拟合结果；

根据所述第一拟合结果的第一线性度值、所述第二拟合结果的第二线性度值和所述父节点的总线性度值计算得到所述划分参数的线性增益值；

遍历所述动力学特征值更新所述候选特征值，以及遍历所述动力学特征更新所述候选特征，根据所述线性增益值最大的所述划分参数得到所述目标动力学特征和所述目标动力学特征值。

在本申请的一些实施例中，所述根据第一拟合结果的第一线性度值、所述第二拟合结果的第二线性度值和所述父节点的总线性度值计算得到所述划分参数的线性增益值，包括：

根据所述第一拟合结果和所述第一候选集合中所述合金样本计算所述第一线性度值；

根据所述第二拟合结果和所述第二候选集合中所述合金样本计算所述第二线性度值；

获取所述父节点中所述合金样本的总样本数量，所述第一候选集合中所述合金样本的第一样本数量，所述第二候选集合中所述合金样本的第二样本数量；

根据所述第一样本数量和所述总样本数量计算第一样本比例，根据所述第二样本数量和所述总样本数量计算第二样本比例；

将所述第一样本比例和所述第一线性度值相乘得到第一线性度指标，将所述第二样本比例和所述第二线性度值相乘得到第二线性度指标；

将所述第一线性度指标和所述第二线性度指标相加并减去所述总线性度值，得到所述划分参数的线性增益值。

在本申请的一些实施例中，所述第一拟合结果为氧化动力学拟合方程，所述动力学特征值包括氧化时间值，所述合金样本还包括氧化增重值；所述根据所述第一拟合结果和所述第一候选集合中所述合金样本计算所述第一线性度值，包括：

将所述第一候选集合中合金样本的所述氧化时间值代入所述氧化动力学拟合方程，计算得到氧化增重拟合值；

计算所述氧化增重值和所述氧化增重拟合值的协方差得到第一中间结果；

计算所述氧化增重值的标准差得到第一标准差，计算所述氧化增重拟合值的标准差得到第二标准差，并将所述第一标准差和所述第二标准差相乘得到第二中间结果；

将所述第一中间结果除以所述第二中间结果，得到所述第一线性度值；

或者，

计算所述氧化增重值和所述氧化增重拟合值的误差平方和得到第三中间结果；

计算所述氧化增重值的总平方和得到第四中间结果；

将所述第三中间结果除以所述第四中间结果得到第五中间结果，将1减去所述第五中间结果得到所述第一线性度值。

在本申请的一些实施例中，所述根据所述目标动力学特征和所述目标动力学特征值，将所述父节点中所述合金样本进行拆分，得到所述父节点的第一子节点和第二子节点，包括：

根据所述目标动力学特征，比较所述父节点中所述合金样本对应的所述动力学特征值与所述目标动力学特征值的数值大小；

若所述动力学特征值小于或等于所述目标动力学特征值，则将所述合金样本划分至所述第一子节点；

若所述动力学特征值大于所述目标动力学特征值，则将所述合金样本划分至所述第二子节点。

在本申请的一些实施例中，所述停止分化条件包括线性度阈值和/或单一度阈值；所述方法还包括：

若所述第一子节点的第一线性度值满足所述线性度阈值，则将所述第一子节点作为所述端节点；

若所述第二子节点的第二线性度值满足所述线性度阈值，则将所述第二子节点作为所述端节点；

和/或，

若所述第一子节点中所述合金样本的氧化时间满足所述单一度阈值，则将所述第一子节点的所述父节点作为所述端节点；

若所述第二子节点中所述合金样本的氧化时间满足所述单一度阈值，则将所述第二子节点的所述父节点作为所述端节点。

在本申请的一些实施例中，所述端节点包括多个合金样本，利用氧化动力学方程得到所述合金样本的氧化动力学拟合方程，所述氧化动力学拟合方程包括所述氧化动力学指数；所述方法还包括：

将所述端节点的所述氧化动力学指数和所述合金样本输入至符号回归模型；

将所述氧化动力学指数作为回归目标，对所述合金样本中的所述动力学特征进行符号回归，得到所述氧化动力学指数的解析方程。

第二方面，本申请实施例还提供了一种氧化动力学指数计算装置，实现如本申请第一方面实施例所述的氧化动力学指数计算方法，包括：

第一获取模块，用于获取预先构建的氧化特征树，所述氧化特征树为二叉树，所述二叉

树包括多个节点和节点边，所述节点包括根节点和至少两个端节点，所述节点边存储有合金特征值，所述合金特征值是对合金数据划分的边界；

数据比较模块，用于从合金数据中依据合金特征数据划分所述节点，用于从所述根节点出发，根据所述合金特征数据与所述节点边上所述合金特征值的比较结果逐一确定目标节点边，直至到达所述端节点，将所述端节点确定为目标端节点；

指数获取模块，用于将所述目标端节点中存储的所述氧化动力学指数作为所述合金数据的氧化动力学指数。

在本申请的一些实施例中，所述装置还包括：

第二获取模块，用于获取氧化数据集；其中，所述氧化数据集包括多个合金样本，每个所述合金样本包括多个动力学特征和对应的动力学特征值；

分化模块，用于基于所述氧化数据集执行动力学特征分化过程，构建所述氧化特征树；所述动力学特征分化过程包括：

构建父节点；所述父节点存储所述合金样本；所述父节点的初始值为所述根节点，所述根节点基于所述氧化特征集构建；

遍历所述父节点中所述合金样本的所述动力学特征和所述动力学特征值，从中选取目标动力学特征和目标动力学特征值；

根据所述目标动力学特征和所述目标动力学特征值，将所述父节点中所述合金样本进行拆分，得到所述父节点的第一子节点和第二子节点，并将所述目标动力学特征值存储于对应的所述节点边；

确定所述第一子节点和/或所述第二子节点未满足停止分化条件，将所述第一子节点和/或所述第二子节点作为所述父节点，执行所述动力学特征分化过程。

在本申请的一些实施例中，所述装置还包括：

解析模块，用于将所述端节点的所述氧化动力学指数和所述合金样本输入至符号回归模型；将所述氧化动力学指数作为回归目标，对所述合金样本中的所述动力学特征进行符号回归，得到所述氧化动力学指数的解析方程。

第三方面，本申请实施例还提供了一种电子设备，包括存储器、处理器，所述存储器存储有计算机程序，所述处理器执行所述计算机程序时实现如本申请第一方面实施例所述的氧化动力学指数计算方法。

第四方面，本申请实施例还提供了一种计算机可读存储介质，所述存储介质存储有程序，所述程序被处理器执行实现如本申请第一方面实施例所述的氧化动力学指数计算方法。

本申请实施例至少包括以下有益效果：

本申请实施例提供了一种氧化动力学指数计算方法、装置、电子设备及存储介质，其中，氧化动力学指数计算方法通过获取预先构建的氧化特征树，氧化特征树为二叉树，二叉树包括多个节点和节点边，节点包括根节点和至少两个端节点，节点边存储有合金数据值，合金特征值是对合金数据划分的边界。然后从合金数据中依据合金特征数据划分节点，具体从氧化特征树的根节点出发，根据合金特征数据与节点边上合金特征值的比较结果逐一确定目标节点边，直至到达端节点，将端节点确定为目标端节点。最后将目标端节点中存储的氧化动力学指数作为该合金数据的氧化动力学指数。由此根据预先构建的氧化特征树，将不同合金成分对应的氧化动力学指数存储至端节点中，通过比较合金数据中的合金特征数据和氧化特



征树节点边逐步确定目标端节点，可以准确计算获取氧化动力学指数和氧化动力学方程，对氧化过程描述、耐氧化材料机理研究和耐氧化性设计等任务具有重要意义，从而促进相关研究发展。

本申请的附加方面和优点将在下面的描述中部分给出，部分将从下面的描述中变得明显，或通过本申请的实践了解到。

## 附图说明

本申请的上述和/或附加的方面和优点从结合下面附图对实施例的描述中将变得明显和容易理解，其中：

- 图 1 是本申请一个实施例提供的氧化动力学指数计算方法的流程示意图；
- 图 2 是本申请另一个实施例提供的氧化动力学指数计算方法的流程示意图；
- 图 3 是图 2 中步骤 S302 的流程示意图；
- 图 4 是图 3 中步骤 S404 的流程示意图；
- 图 5 是图 4 中步骤 S501 的流程示意图；
- 图 6 是图 2 中步骤 S303 的流程示意图；
- 图 7 是图 2 中步骤 S304 的流程示意图；
- 图 8 是图 2 中步骤 S304 的另一流程示意图；
- 图 9 是本申请另一个实施例提供的氧化动力学指数计算方法的流程示意图；
- 图 10 是本申请一个实施例提供的氧化特征树示意图；
- 图 11 是本申请一个实施例提供的氧化动力学指数计算装置模块示意图；
- 图 12 是本申请另一个实施例提供的氧化动力学指数计算装置模块示意图；
- 图 13 是本申请一个实施例提供的电子设备的结构示意图。

附图标记：第一获取模块 100、数据比较模块 200、指数获取模块 300、第二获取模块 400、分化模块 500、解析模块 600、电子设备 1000、处理器 1001、存储器 1002。

## 具体实施方式

为了使本申请的目的、技术方案及优点更加清楚明白，以下结合附图及实施例，对本申请进行进一步详细说明。应当理解，此处所描述的具体实施例仅用以解释本申请，并不用于限定本申请。

下面详细描述本申请的实施例，实施例的示例在附图中示出，其中自始至终相同或类似的标号表示相同或类似的元件或具有相同或类似功能的元件。下面通过参考附图描述的实施例是示例性的，仅用于解释本申请，而不能理解为对本申请的限制。

在本申请的描述中，需要理解的是，涉及到方位描述，例如上、下、前、后、左、右等指示的方位或位置关系为基于附图所示的方位或位置关系，仅是为了便于描述本申请和简化描述，而不是指示或暗示所指的装置或元件必须具有特定的方位、以特定的方位构造和操作，因此不能理解为对本申请的限制。

在本申请的描述中，若干的含义是一个或者多个，多个的含义是两个以上，大于、小于、

超过等理解为不包括本数，以上、以下、以内等理解为包括本数。如果有描述到第一、第二只是用于区分技术特征为目的，而不能理解为指示或暗示相对重要性或者隐含指明所指示的技术特征的数量或者隐含指明所指示的技术特征的先后关系。

本申请的描述中，除非另有明确的限定，设置、安装、连接等词语应做广义理解，所属技术领域技术人员可以结合技术方案的具体内容合理确定上述词语在本申请中的具体含义。

合金的氧化是一种重要的氧化反应过程，对材料的性能和寿命有着重要影响。了解合金氧化的动力学行为，即氧化过程中增重的速率和变化规律，对于耐氧化材料机理研究和耐氧化性设计等任务具有重要意义。通过建立氧化动力学方程可以更好地描述和预测合金的氧化增重过程，了解氧化反应的速率与时间、温度、压强等测试条件之间的关系。

氧化动力学指数是建立氧化动力学方程的重要参数之一，相关技术中的氧化动力学指数通常是一个固定值，用于描述特定合金在特定氧化条件下的氧化规律。然而这种方法无法研究氧化动力学指数本身与合金成分、测试条件之间的定量关系，也无法对多种合金在不同测试条件下的氧化特性进行全面描述。因此难以准确计算不同合金数据的氧化动力学指数建立对应的氧化动力学方程，阻碍了相关研究的进一步发展。

基于此，本申请实施例提供了一种氧化动力学指数计算方法、装置、电子设备及存储介质。能够根据预先构建的氧化特征树，将不同合金成分对应的氧化动力学指数存储至端节点中，通过比较合金数据中的合金特征数据和氧化特征树节点边逐步确定目标端节点，可以准确计算获取氧化动力学指数和氧化动力学方程，对氧化过程描述、耐氧化材料机理研究和耐氧化性设计等任务具有重要意义，从而促进相关研究发展。

本申请实施例提供氧化动力学指数计算方法、装置、电子设备及存储介质，具体通过如下实施例进行说明，首先描述本申请实施例中的氧化动力学指数计算方法。

本申请实施例提供的氧化动力学指数计算方法，涉及材料技术领域，尤其涉及合金技术领域。本申请实施例提供的氧化动力学指数计算方法可应用于终端中，也可应用于服务器端中，还可以是运行于终端或服务器端中的计算机程序。举例来说，计算机程序可以是操作系统中的原生程序或软件模块；可以是本地(Native)应用程序(APP, Application)，即需要在操作系统中安装才能运行的程序，如支持氧化动力学指数计算的客户端，即只需要下载到浏览器环境中就可以运行的程序。总而言之，上述计算机程序可以是任意形式的应用程序、模块或插件。其中，终端通过网络与服务器进行通信。该氧化动力学指数计算方法可以由终端或服务器执行，或由终端和服务器协同执行。

在一些实施例中，终端可以是智能手机、平板电脑、笔记本电脑、台式计算机或者智能手表等。服务器可以是独立的服务器，也可以是提供云服务、云数据库、云计算、云函数、云存储、网络服务、云通信、中间件服务、域名服务、安全服务、内容分发网络(Content Delivery Network, CDN)、以及大数据和人工智能平台等基础云计算服务的云服务器；也可以是区块链系统中的服务节点，该区块链系统中的各服务节点之间组成点对点(P2P, Peer To Peer)网络，P2P协议是一个运行在传输控制协议(TCP, Transmission Control Protocol)协议之上的应用层协议。服务器上可以安装氧化动力学指数计算系统的服务端，通过该服务端可以与终端进行交互，例如服务端上安装对应的软件，软件可以是实现xxxxx方法的应用等，但并不局限于以上形式。终端与服务器之间可以通过蓝牙、USB(Universal Serial Bus, 通用串行总线)或者网络等通讯连接方式进行连接，本实施例在此不做限制。

本申请可用于众多通用或专用的计算机系统环境或配置中。例如：个人计算机、服务器计算机、手持设备或便携式设备、平板型设备、多处理器系统、基于微处理器的系统、置顶盒、可编程的消费电子设备、网络 PC、小型计算机、大型计算机、包括以上任何系统或设备的分布式计算环境等等。本申请可以在由计算机执行的计算机可执行指令的一般上下文中描述，例如程序模块。一般地，程序模块包括执行特定任务或实现特定抽象数据类型的例程、程序、对象、组件、数据结构等等。也可以在分布式计算环境中实践本发明，在这些分布式计算环境中，由通过通信网络而被连接的远程处理设备来执行任务。在分布式计算环境中，程序模块可以位于包括存储设备在内的本地和远程计算机存储介质中。

下面描述本发明实施例中的氧化动力学指数计算方法。

参照图 1 所示，本申请实施例提供了一种氧化动力学指数计算方法，方法包括但不限于以下步骤 S101 至步骤 S103。

步骤 S101，获取预先构建的氧化特征树。

在一些实施例中，氧化特征树为二叉树，节点包括根节点和至少两个端节点。可以理解的是，二叉树是一种树状数据结构，根节点是二叉树的顶部节点，它是树的起始点，在一棵二叉树中只有一个根节点。二叉树的每个节点最多有两个子节点，没有子节点的节点为端节点，也被称为叶节点。

节点和其上下级节点之间通过节点边连接，在一些实施例中，氧化特征树的节点边存储有合金特征值，合金特征值是将合金数据划分至不同节点的边界，可以是多元合金中某个合金成分的质量百分比，本领域技术人员可以根据实际需求设置，本实施例对此不做限制。

步骤 S102，从合金数据中依据合金特征数据划分节点，从根节点出发，根据合金特征数据与节点边上合金特征值的比较结果逐一确定目标节点边，直至到达端节点，将端节点确定为目标端节点。

合金数据中包括但不限于成分数据、物理性质数据和化学性质数据等。示例性的，成分数据包括各合金成分及其质量百分比，物理性质数据则包括合金的密度、热导率、电导率、熔点和硬度，化学性质数据则包括化学反应性和耐腐蚀性等。在一些实施例中，从合金数据中依据合金特征数据划分节点，具体是将多元合金的合金成分以及每种合金成分的质量百分比等数据作为合金特征数据，本实施例对此不做限制。

在一些实施例中，从根节点出发，比较合金特征数据和节点边上的合金特征值从而确定目标节点边。示例性的，根节点有两个子节点，分别是左子节点和右子节点，从根节点到达左子节点的节点边是铁元素的质量百分比小于或等于 30wt.%，从根节点到达右子节点的节点边是铁元素的质量百分比大于 30wt.%。因此当合金成分中铁元素的质量百分比小于或等于 30wt.% 时，符合根节点和左子节点之间的节点边上的合金特征值，否则符合根节点和右子节点之间的节点边上的合金特征值。由此通过比较合金特征数据和节点边上的合金特征值可以确定目标节点边，直至到达端节点，然后将该端节点确定为合金数据的目标端节点。

步骤 S103，将目标端节点中存储的氧化动力学指数作为合金数据的氧化动力学指数。

在一些实施例中，根据氧化数据集的合金样本预先构建氧化特征树，在氧化特征树的每个端节点中存储有不同合金样本对应的氧化动力学指数。将目标端节点中存储的氧化动力学指数作为合金数据的氧化动力学指数，由此通过比较合金数据中的合金特征数据和氧化特征树节点边逐步确定目标端节点，可以准确计算获取氧化动力学指数和氧化动力学方程。对

氧化过程描述、耐氧化材料机理研究和耐氧化性设计等任务具有重要意义，从而促进相关研究发展。

参照图 2 所示，在本申请的一些实施例中，构建氧化特征树还可以包括但不限于以下步骤 S201 至步骤 S202。

步骤 S201，获取氧化数据集。

在一些实施例中，氧化数据集包括多个合金样本，每个合金样本包括多个动力学特征和对应的动力学特征值，因此氧化数据集中的每个动力学特征都有多个动力学特征值。每个合金样本还包括氧化增重及其对应的氧化增重值。可以理解的是，通过查阅文献和实验合成的方法，可以积累多元合金的氧化数据集。将氧化数据集输入表格文件，以 csv 文件的形式存储。

示例性的，超临界 CO<sub>2</sub> 合金样本共有 95 个，每个合金样本的动力学特征包括合金成分，如铁、镍、铬、铝、钴、锰、硅、钛、铜、碳、铋等，对应的动力学特征值为合金成分对应的质量百分比。动力学特征还包括温度、压强、氧化时间等测试条件。参照下表 1 所示，表格文件中包括了合金样本的动力学特征以及回归目标，如氧化增重等。具体的，表 1 中的每一行代表一个合金样本，每一列代表一个动力学特征，最后一列代表氧化增重，其中动力学特征中的氧化时间置于表格的倒数第二列，本实施例对此不做限制。

表 1

	铁 (wt. %)	镍 (wt. %)	...	铋 (wt. %)	温度 (°C)	压强 (bars)	氧化 时间 (h)	氧化增重 (mg/dm <sup>2</sup> )
样本 1	0.07	59.5	...	0	650	200	500	9.093
...	...	...	...	...	...	...	...	...
样本 95	3	52.7	...	1.4	500	300	1000	10.850

在一些实施例中，对氧化数据集进行数据预处理。具体的，对动力学特征中的氧化时间对应的氧化时间值进行取对数处理，同时将氧化增重对应的氧化增重值的单位统一转化为毫克每平方分米 (mg/dm<sup>2</sup>) 并进行取对数处理，得到如表 2 所述的表格文件。

表 2

	铁 (wt. %)	镍 (wt. %)	...	铋 (wt. %)	温度 (°C)	压强 (bars)	氧化时间 (h)	氧化增重 (mg/dm <sup>2</sup> )
样本 1	0.07	59.5	...	0	650	200	6.21	2.207
...	...	...	...	...	...	...	...	...
样本 95	3	52.7	...	1.4	500	300	6.91	2.284

在一些实施例中，将动力学特征中的合金成分通过加法、减法和乘法进行随机组合，生成预设数量的二次合金特征。示例性的，铁+镍、钴-铝+锰、(铁-钴) × 硅等是随机生成的二次合金特征。具体的，可以生成合金成分特征数量一倍的二次合金特征，然后加入至氧化

数据集中，由此可以表征更好的非线性关系。二次合金特征和原始的合金成分是同一层级的动力学特征，均属于合金特征。形成的表格文件如表 3 所示，二次合金特征置于氧化时间对应的倒数第二列之前，也可以置于合金成分之前，本实施例对此不做限制。

表 3

	铁+镍 (wt. %)	钴-铝+锰 (wt. %)	...	(铁-钴) × 硅 (wt. %)	铁 (wt. %)	镍 (wt. %)	...
样本 1	59.57	12.4	...	24.6	0.07	59.5	...
...	...	...	...	...	...	...	...
样本 95	55.7	18.5	...	17.8	3	52.7	...

步骤 S202，基于氧化数据集执行动力学特征分化过程，构建氧化特征树。

在一些实施例中，根据氧化数据集中合金样本的动力学特征值执行动力学特征分化过程，从而构建得到氧化特征树。具体的，构建氧化特征树的具体过程可以包括但不限于以下步骤 S301 至 S304。

步骤 S301，构建父节点。

在一些实施例中，父节点存储有氧化数据集中的合金样本，父节点的初始值为根节点，根节点基于氧化数据集构建。因此根节点存储有氧化数据集中的所有合金样本。可以理解的是，在二叉树结构中，除了根节点没有父节点，其余每个节点都有且仅有一个父节点。

步骤 S302，遍历父节点中合金样本的动力学特征和动力学特征值，从中选取目标动力学特征和目标动力学特征值。

在一些实施例中，遍历父节点中合金样本的动力学特征和对应的动力学特征值，从中选取一个目标动力学特征及其对应的目标动力学特征值。对于同一个动力学特征而言，不同的合金样本中对应有不同的动力学特征值。例如当动力学特征为铁元素时，对应的动力特征值为铁元素的质量百分比，在合金样本 1 中的动力学特征值为 0.07wt. %，...，在合金样本 95 中的动力学特征值为 3wt. %。因此选取一个动力学特征作为目标动力学特征后，还需要进一步选取一个动力学特征值作为目标动力学特征值，为构建氧化特征树提供了分支条件。

步骤 S303，根据目标动力学特征和目标动力学特征值，将父节点中合金样本进行拆分，得到父节点的第一子节点和第二子节点，并将目标动力学特征值存储于对应的节点边。

在一些实施例中，根据目标动力学特征和目标动力学特征值，将父节点中合金样本进行拆分，得到父节点的第一子节点和第二子节点。具体是将父节点中合金样本与目标动力学特征和目标动力学特征值进行比较，根据比较结果将合金样本划分为两部分，一部分作为第一子节点，另一部分作为第二子节点。示例性的，父节点中合金样本有 95 个，根据目标动力学特征和目标动力学特征值，对父节点中的 95 个合金样本进行拆分，得到包含 60 个合金样本的第一子节点和包含 35 个合金样本的第二子节点。

在一些实施例中，得到父节点的第一子节点和第二子节点后，使用节点边连接父节点和第一子节点，以及使用节点边连接父节点和第二子节点，并将目标动力学特征值存储于节点边中。可以理解的是，节点边中还存储了目标动力学特征，本实施例对此不做限制。

步骤 S304, 确定第一子节点和/或第二子节点未满足停止分化条件, 将第一子节点和/或第二子节点作为父节点, 执行动力学特征分化过程。

在一些实施例中, 如果第一子节点满足停止分化条件, 则将第一子节点作为端节点并停止分化, 否则将第一子节点作为父节点, 迭代执行动力学特征分化过程。类似的, 如果第二子节点满足停止分化条件, 则将第二子节点作为端节点并停止分化, 否则将第二子节点作为父节点, 迭代执行动力学特征分化过程, 由此基于氧化数据集构建得到氧化特征树。

参照图 3 所示, 在本申请的一些实施例中, 上述步骤 S302 还可以包括但不限于以下步骤 S401 至步骤 S405。

步骤 S401, 从动力学特征中选取划分参数。

在一些实施例中, 划分参数包括候选特征和候选特征值, 候选特征值从合金样本中候选特征的动力学特征值中遍历选取得到。具体的, 先将任意一个动力学特征作为候选特征, 然后根据候选特征从合金样本中对应的动力学特征值选取一个作为候选特征值。示例性的, 将动力学特征中的铁元素作为候选特征, 在包含 95 个合金样本的父节点中对应铁元素的 95 个动力学特征值, 第 22 个合金样本铁元素的动力学特征值为 49.74wt.%, 可以将其作为候选特征值, 本实施例对此不做限制。

步骤 S402, 根据候选特征值的数值大小将父节点中合金样本划分为第一候选集合和第二候选集合。

在一些实施例中, 根据候选特征值的数值大小, 将父节点中合金样本中的候选特征对应的动力学特征值与候选特征值进行比较。如果合金样本的动力学特征值小于或者等于候选特征值, 则将该合金样本划分至第一候选集合; 如果合金样本的动力学特征值大于候选特征值, 则将合金样本划分至第二候选集合, 由此将父节点中合金样本划分为第一候选集合和第二候选集合。

示例性的, 候选特征是动力学特征中的铁元素, 候选特征值是第 22 个合金样本中铁元素的质量百分比 49.74wt.%. 根据候选特征值的数值大小将父节点中 95 个合金样本进行划分, 如果合金样本中铁元素的动力学特征值小于或等于 49.74wt.%, 则将该合金样本划分至第一候选集合; 如果合金样本中铁元素的动力学特征值大于 49.74wt.%, 则将该合金样本划分至第二候选集合。最终可以得到包含 65 个合金样本的第一候选集合和包含 30 个合金样本的第二候选集合, 本实施例对此不做限制。

步骤 S403, 利用氧化动力学方程得到第一候选集合的第一拟合结果, 以及第二候选集合的第二拟合结果。

合金的氧化规律满足氧化动力学方程  $y=kt^n$ , 其中  $y$  为氧化增重值,  $k$  为氧化动力学常数,  $t$  为氧化时间值,  $n$  为氧化动力学指数。在一些实施例中, 为了方便快捷地利用氧化动力学方程对合金样本进行拟合, 对动力学特征中的氧化时间值和氧化增重值进行取对数处理, 对该氧化动力学方程同样进行取对数处理。即得到  $\ln(y)=n \cdot \ln(t)+\ln(k)$ , 其中  $\ln(\cdot)$  表示取对数处理, 由此氧化动力学方法在对数空间的表达形式为一个线性关系。因此在本申请实施例中, 氧化增重值对应为  $\ln(y)$ , 氧化时间值对应为  $\ln(t)$ , 拟合常数对应为  $\ln(k)$ 。

在一些实施例中, 利用取对数处理后的氧化动力学方程对第一候选集合中的合金样本进行拟合, 得到第一拟合结果; 以及利用取对数处理后的氧化动力学方程对第二候选集合中的合金样本进行拟合, 得到第二拟合结果。

具体的，与氧化动力学方程有关的动力学特征是氧化时间以及合金样本中的氧化增重。由于氧化动力学方法在对数空间的表达形式为一个线性关系，本申请实施例将氧化增重作为回归目标，将氧化时间作为变量对候选集合进行拟合，得到对应的拟合结果，即氧化动力学拟合方程，形如  $\ln(y') = n \cdot \ln(t) + \ln(k)$ ，其中， $\ln(y')$  为氧化增重拟合值， $\ln(k)$  为氧化动力学常数， $\ln(t)$  为氧化时间值， $n$  为氧化动力学指数。通过计算氧化增重拟合值  $\ln(y')$  和合金样本中氧化增重值  $\ln(y)$  的欧式距离误差，可以计算氧化动力学指数  $n$  和拟合常数  $\ln(k)$  的大小，从而将合金样本中的其他动力学特征作为分支依据，本实施例对此不做限制。

步骤 S404，根据第一拟合结果的第一线性度值、第二拟合结果的第二线性度值和父节点的总线性度值计算得到划分参数的线性增益值。

在一些实施例中，使用线性度值衡量第一候选集合和第二候选集合中合金样本的数据拟合准确程度。示例性的，使用皮尔逊相关系数（Pearson correlation coefficient）计算线性度值。可以理解的是，皮尔逊相关系数的取值范围在-1 到 1 之间，其中-1 表示完全负相关，1 表示完全正相关，0 表示没有线性相关性。因此，线性度越接近 1 或-1，说明合金样本越接近线性关系，线性拟合的效果越好；而线性度接近 0，则意味着合金样本之间缺乏线性关系，线性拟合的效果较差。

在一些实施例中，根据第一候选集合中合金样本计算第一拟合结果的第一线性度值、根据第二候选集合中合金样本可以计算第二拟合结果的第二线性度值，然后结合第一线性度值、第二线性度值和总线性度值计算得到划分参数对应的分化结果的线性增益值。可以理解的是，当父节点为根节点时，先利用取对数处理后的氧化动力学方程对氧化数据集中的合金样本进行拟合，得到总拟合结果，再根据氧化数据集中合金样本计算总拟合结果的总线性度值。

步骤 S405，遍历动力学特征值更新候选特征值，以及遍历动力学特征更新候选特征，根据线性增益值最大的划分参数得到目标动力学特征和目标动力学特征值。

一个动力学特征对应应有多个动力学特征值，示例性的，父节点存储有 95 个合金样本，因此每个动力学特征对应应有 95 个动力学特征值。通过遍历动力学特征值更新候选特征值，具体的，当候选特征为铁元素时，将 95 个合金样本中铁元素的质量百分比依次作为候选特征值。由此对父节点中合金样本进行拆分得到 95 个不同划分参数的第一候选集合和第二候选集合，并计算每个划分参数的线性增益值。

在一些实施例中，在铁元素的 95 个质量百分比都遍历完成后，遍历动力学特征更新候选特征。具体的，将表 3 中镍元素的下一个动力学特征，例如镍元素作为候选特征，并遍历 95 个合金样本中镍元素的质量百分比作为候选特征值，对父节点中合金样本进行拆分得到第一候选集合和第二候选集合。由此对父节点中合金样本进行拆分得到 95 个不同划分参数的第一候选集合和第二候选集合，并计算每个划分参数的线性增益值，这里假设镍元素具有 95 个不同的取值，本实施例对此不做限制。

在一些实施例中，可以以动力学特征为单位遍历合金样本中的动力学特征值，也可以以合金样本中的动力学特征值为单位遍历每个动力学特征，直至把父节点中每个动力学特征及其每个动力学特征值都作为划分参数。最后根据线性增益最大的划分参数，将划分参数中的候选特征作为目标动力学特征值，将划分参数中的候选特征值作为目标动力学特征值，由此得到目标动力学特征和目标动力学特征值。

参照图 4 所示，在本申请的一些实施例中，上述步骤 S404 还可以包括但不限于以下步骤

S501 至步骤 S506。

步骤 S501，根据第一拟合结果和第一候选集合中合金样本计算第一线性度值。

在一些实施例中，根据第一拟合结果的氧化动力学拟合方程和第一候选集合中合金样本，计算得到第一拟合结果的第一线性度值。可以理解的是，第一线性度值用于衡量第一拟合结果的准确程度。具体的，将第一候选集合中合金样本的氧化时间值代入氧化动力学拟合方程中，根据已知的拟合常数和氧化动力学指数可以利用氧化动力学拟合方程计算得到氧化增重拟合值。最后根据合金样本中真实的氧化增重值和计算的氧化增重拟合值计算第一线性度值，本实施例对此不做限制。

步骤 S502，根据第二拟合结果和第二候选集合中合金样本计算第二线性度值。

在一些实施例中，根据第二拟合结果的氧化动力学拟合方程和第二候选集合中合金样本，计算得到第二拟合结果的第二线性度值。可以理解的是，第二线性度值用于衡量第二拟合结果的准确程度。具体的，将第二候选集合中合金样本的氧化时间值代入氧化动力学拟合方程中，根据已知的拟合常数和氧化动力学指数可以利用氧化动力学拟合方程计算得到氧化增重拟合值。最后根据合金样本中真实的氧化增重值和计算的氧化增重拟合值计算第二线性度值，本实施例对此不做限制。

步骤 S503，获取父节点中合金样本的总样本数量，第一候选集合中合金样本的第一样本数量，第二候选集合中合金样本的第二样本数量。

在一些实施例中，获取父节点中合金样本的总样本数量，以及获取第二候选集合汇总合金样本的第一样本数量和第二候选集合中合金样本的第二样本数量。可以理解的是，父节点的总样本数量是第一样本数量和第二样本数量之和。示例性的，第一候选集合中有 60 个合金样本，第二候选集合中有 35 个合金样本，则父节点中有  $60+35=95$  个合金样本。

步骤 S504，根据第一样本数量和总样本数量计算第一样本比例，根据第二样本数量和总样本数量计算第二样本比例。

在一些实施例中，将第一样本数量除以总样本数量，可以计算得到第一候选集合对应的第一样本比例；将第二样本数量除以总样本数量，可以计算得到第二候选集合对应的第二样本比例。

步骤 S505，将第一样本比例和第一线性度值相乘得到第一线性度指标，将第二样本比例和第二线性度值相乘得到第二线性度指标。

在一些实施例中，将第一样本比例和第一线性度值相乘得到第一线性度指标，将第二样本比例和第二线性度值相乘得到第二线性度指标。具体的， $K$  代表总样本数量， $k_1$  代表第一样本数量， $k_2$  代表第二样本数量， $LG_i$  代表第一线性度值， $LG_r$  代表第二线性度值。则第一样本比例为  $k_1/K$ ，第二样本比例为  $k_2/K$ ，进而第一线性度指标为  $LG_i \cdot k_1/K$ ，第二线性度指标为  $LG_r \cdot k_2/K$ 。

步骤 S506，将第一线性度指标和第二线性度指标相加并减去总线性度值，得到划分参数的线性增益值。

在一些实施例中，将第一线性度指标和第二线性度指标进行相加，即  $LG_i \cdot k_1/K + LG_r \cdot k_2/K$ ，然后减去总线性度值  $LG_p$ ，即得到划分参数的线性增益值  $\Delta LG$ 。因此  $\Delta LG_{i,j} = LG_i \cdot k_1/K + LG_r \cdot k_2/K - LG_p$ ，其中， $i$  代表第  $i$  个动力学特征， $j$  代表动力学特征的第  $j$  个动力学特征值，即第  $j$  个合金样本中的动力学特征值。由此可以遍历父节点中合金样本的每



个动力学特征及动力学特征值并作为划分参数，对父节点中合金样本进行拆分并计算划分参数对应的线性增益值。

参照图 5 所示，在本申请的一些实施例中，上述步骤 S501 还可以包括但不限于以下步骤 S601 至步骤 S607。

步骤 S601，将第一候选集合中合金样本的氧化时间值代入氧化动力学拟合方程，计算得到氧化增重拟合值。

在一些实施例中，将第一候选集合中每个合金样本的氧化时间值代入氧化动力学拟合方程  $\ln(y') = n \cdot \ln(t) + \ln(k)$ ，根据已知的拟合常数和氧化动力学指数，利用该氧化动力学方程可以计算得到氧化增重拟合值。例如第一候选集合中有 60 个合金样本，则可以根据其 60 个氧化时间值对应计算得到 60 个氧化增重拟合值。

步骤 S602，计算氧化增重值和氧化增重拟合值的协方差得到第一中间结果。

在一些实施例中，获取第一候选集合中合金样本的氧化增重值，计算氧化增重值和对应的氧化增重拟合值的协方差，并将协方差作为第一中间结果。可以理解的是，本实施例中的氧化增重值为  $y$ ，氧化增重拟合值为  $y'$ ，本领域技术人员也可以根据实际需求选取  $\ln(y)$  作为氧化增长值和  $\ln(y')$  作为氧化增重拟合值，本实例对此不做限制。

步骤 S603，计算氧化增重值的标准差得到第一标准差，计算氧化增重拟合值的标准差得到第二标准差，并将第一标准差和第二标准差相乘得到第二中间结果。

在一些实施例中，根据第一候选集合中合金样本的氧化增重值进行计算，得到第一标准差。具体是先计算合金样本的氧化增重平均值，然后将每一个合金样本的氧化增重值减去氧化增重平均值得到差值结果，对差值结果取平方运算，得到该合金样本的平方结果。最后对所有合金样本的平方结果进行累加并开平方运算即可得到第一标准差。类似的，根据氧化增重拟合值进行计算，得到第二标准差。最后将第一标准差和第二标准差进行相乘得到第二中间结果，本实施例对此不做限制。

步骤 S604，将第一中间结果除以第二中间结果，得到第一线性度值。

在一些实施例中，将第一中间结果除以第二中间结果即可计算得到第一拟合结果的第一线性度值。具体的，第一线性度值满足以下计算公式：

$$LG_l = \frac{\sum_{i=1}^{k1} (y_i - \bar{y})(y'_i - \bar{y}')}{\sqrt{\sum_{i=1}^{k1} (y_i - \bar{y})^2 \sum_{i=1}^{k1} (y'_i - \bar{y}')^2}}$$

其中， $k1$  代表第一候选集合中合金样本的第一样本数量， $y$  代表氧化增重值， $\bar{y}$  代表氧化增重平均值， $y'$  代表氧化增重拟合值， $\bar{y}'$  代表氧化增重拟合平均值。

可以理解的是，第二线性度值计算过程的具体实施方式与第一线性度值基本一致，满足以下计算公式：

$$LG_r = \frac{\sum_{i=1}^{k2} (y_i - \bar{y})(y'_i - \bar{y}')}{\sqrt{\sum_{i=1}^{k2} (y_i - \bar{y})^2 \sum_{i=1}^{k2} (y'_i - \bar{y}')^2}}$$

其中， $k2$  代表第二候选集合中合金样本的第二样本数量， $y$  代表氧化增重值， $\bar{y}$  代表氧化增重平均值， $y'$  代表氧化增重拟合值， $\bar{y}'$  代表氧化增重拟合平均值。

在一些实施例中，第一线性度的计算还可以包括但不限于步骤 S704 至步骤 S707。

步骤 S605，计算氧化增重值和氧化增重拟合值的误差平方和得到第三中间结果。

在一些实施例中，计算氧化增重值和氧化增重拟合值的误差平方和。具体的，对于第一候选集合中的每一个合金样本，将氧化增长值减去氧化增重拟合值得到拟合差值，然后对拟合差值取平方运算得到平方结果，最后将所有平方结果进行累加得到误差平方和并将其作为第三中间结果。

步骤 S606，计算氧化增重值的总平方和得到第四中间结果。

在一些实施例中，根据第一候选集合中合金样本的氧化增重值可以计算得到氧化增重平均值。对于每一个合金样本，将其氧化增重值减去氧化增重平均值得到差值结果，将差值结果取平方运算得到平方结果，最后将所有平方结果进行累加得到氧化增重值的总平方和并将其作为第四中间结果。

步骤 S607，将第三中间结果除以第四中间结果得到第五中间结果，将 1 减去第五中间结果得到第一线性度值。

在一些实施例中，将第三中间结果除以第四中间结果得到第五中间结果，最后将 1 减去第五中间结果即可计算得到第一线性度值。具体的，第一线性度值满足以下公式：

$$LG_l = 1 - \frac{\sum_{i=1}^{k1} (y_i - y'_i)^2}{\sum_{i=1}^{k1} (y_i - \bar{y})^2}$$

其中， $k1$ 代表第一候选集合中合金样本的第一样本数量， $y$ 代表氧化增重值， $\bar{y}$ 代表氧化增重平均值， $y'$ 代表氧化增重拟合值。

可以理解的是，第二线性度值计算过程的具体实施方式与第一线性度值基本一致，满足以下计算公式：

$$LG_r = 1 - \frac{\sum_{i=1}^{k2} (y_i - y'_i)^2}{\sum_{i=1}^{k2} (y_i - \bar{y})^2}$$

其中， $k2$ 代表第二候选集合中合金样本的第二样本数量， $y$ 代表氧化增重值， $\bar{y}$ 代表氧化增重平均值， $y'$ 代表氧化增重拟合值。

参照图 6 所示，在本申请的一些实施例中，上述步骤 S303 还可以包括但不限于以下步骤 S701 至步骤 S703。

步骤 S701，根据目标动力学特征，比较父节点中合金样本对应的动力学特征值与目标动力学特征值的数值大小。

在一些实施例中，根据目标动力学特征，逐一比较父节点中合金样本对应的动力学特征值与目标动力学特征值的数值大小。示例性的，当目标动力学特征为铁元素，目标动力学特征值为 49.74wt.% 时，便逐一将父节点中 95 个合金样本的铁元素的质量百分比和 49.74wt.% 进行数值大小的比较。

步骤 S702，若动力学特征值小于或等于目标动力学特征值，则将合金样本划分至第一子节点。

在一些实施例中，如果动力学特征值小于或等于目标动力学特征值，例如合金样本中铁元素的质量百分比小于或等于 49.74wt.% 时，则将该合金样本划分至第一子节点。可以理解的是，此时第一子节点对应划分参数为铁元素及其质量百分比为 49.74wt.% 进行划分得到第一候选集合，因此第一子节点的线性度值即该第一候选集合的第一线性度值。类似的，第一子节点的氧化动力学拟合方程即该第一候选集合的第一拟合结果。

步骤 S703，若动力学特征值大于目标动力学特征值，则将合金样本划分至第二子节点。

在一些实施例中，如果动力学特征值大于目标动力学特征值，例如合金样本中铁元素的质量百分比大于 49.74wt.%时，则将该合金样本划分至第二子节点。可以理解的是，此时第二子节点对应划分参数为铁元素及其质量百分比为 49.74wt.%进行划分得到第二候选集合，因此第二子节点的线性度值即该第二候选集合的第二线性度值。类似的，第二子节点的氧化动力学拟合方程即该第二候选集合的第二拟合结果。

参照图 7 和图 8 所示，在本申请的一些实施例中，上述步骤 S304 还可以包括但不限于以下步骤 S801 至步骤 S802 和/或步骤 S901 至步骤 S902。

步骤 S801，若第一子节点的第一线性度值满足线性度阈值，则将第一子节点作为端节点。

在一些实施例中，停止分支条件包括线性度阈值，例如线性度阈值为 0.9。若第一子节点的第一线性度值满足线性度阈值，例如第一线性度值大于 0.9，则将第一子节点作为端节点。可以理解的是，若第一线性度值不满足线性度阈值，则将第一子节点作为父节点执行动力学特征分化过程，同时将第一子节点的第一线性度值对应作为父节点的总线性度值，本实施例对此不做限制。

步骤 S802，若第二子节点的第二线性度值满足线性度阈值，则将第二子节点作为端节点。

在一些实施例中，若第二子节点的第二线性度值满足线性度阈值，例如第二线性度值大于 0.9，则将第二子节点作为端节点。可以理解的是，若第二线性度值不满足线性度阈值，则将第二子节点作为父节点执行动力学特征分化过程，同时将第二子节点的第二线性度值对应作为父节点的总线性度值，本实施例对此不做限制。

步骤 S901，若第一子节点中合金样本的氧化时间满足单一度阈值，则将第一子节点的父节点作为端节点。

在一些实施例中，停止分支条件还可以包括但不限于单一度阈值，例如单一度阈值为 2。如果第一子节点中合金样本的氧化时间对应的氧化时间值满足单一度阈值，例如氧化时间值只有 500h 和 1200h 两种不同取值，即合金样本中的氧化时间值小于或等于两种情形，则将第一子节点的父节点作为端节点。可以理解的是，由于合金样本的氧化时间值小于或等于两种情形时属于明显的过拟合线性，会导致氧化动力学方程的回归不稳定，因此该节点不允许存在，需要将其父节点作为端节点。

步骤 S902，若第二子节点中合金样本的氧化时间满足单一度阈值，则将第二子节点的父节点作为端节点。

在一些实施例中，如果第二子节点中合金样本的氧化时间对应的氧化时间值满足单一度阈值，例如氧化时间值只有 100h 和 300h 两种不同取值，即合金样本中的氧化时间值小于或等于两种情形，则将第二子节点的父节点作为端节点。可以理解的是，由于合金样本的氧化时间值小于或等于两种情形时属于明显的过拟合线性，会导致氧化动力学方程的回归不稳定，因此该节点不允许存在，需要将其父节点作为端节点。

可以理解的是，停止分支条件还可以是子节点的线性度值与其父节点的线性度值相比较，例如子节点的线性度值小于父节点的线性度值，则对应的父节点作为端节点，本领域技术人员可以根据实际需求设置不同的停止分支条件，本实施例对此不做限制。

参照图 9 所示，在本申请的一些实施例中，氧化动力学指数计算方法还可以包括但不限于以下步骤 S1001 至步骤 S1002。

步骤 S1001，将端节点的氧化动力学指数和合金样本输入至符号回归模型。

在一些实施例中，端节点包括至少一个合金样本，利用氧化动力学方程得到合金样本的氧化动力学拟合方程，氧化动力学拟合方程包括所述氧化动力学指数。因此，端节点中各个合金样本被描述为同一个氧化动力学拟合方程，这些合金样本具有相同的氧化动力学指数。

在一些实施例中，构建氧化特征树后可以得到多个端节点，将端节点的氧化动力学指数和对应的合金样本输入至符号回归模型。示例性的，符号回归模型是基于开源的回归算法构建的，例如 `gplearn` 或者 `SISSO` 等，本实施例对此不做限制。

步骤 S1002，将氧化动力学指数作为回归目标，对合金样本中的动力学特征进行符号回归，得到氧化动力学指数的解析方程。

在一些实施例中，将端节点的氧化动力学指数作为回归目标，对端节点中合金样本的动力学特征进行符号回归，可以得到氧化动力学指数和动力学特征之间的解析表达式，即氧化动力学指数的解析方程。形如  $n=f(\text{动力学特征 } 1, \text{动力学特征 } 2, \dots, \text{动力学特征 } m)$ ，其中  $f$  代表解析函数， $n$  代表氧化动力学指数。

可以理解的是，将得到的关于  $n$  的函数代入氧化动力学方程  $y' = kt^n$  可以得到氧化增重的解析方程，由此最终的氧化动力学方程满足动力学过程并且完全解析，有效解析了多元合金的氧化机理，便于指导设计更加耐氧化的新型材料，促进了相关研究发展。

以下通过一个完整实施例说明本申请：

参照图 10 所示的氧化特征树示意图，本实例对超临界  $\text{CO}_2$  合金氧化的机制为研究对象。获取的氧化数据集中有 95 条超临界  $\text{CO}_2$  合金样本，其中每个合金样本的动力学特征包括合金成分，如铁、镍、铬、铝、钴、锰、硅、钛、铜、碳、铋等，对应的动力学特征值为合金成分对应的质量分数。动力学特征还包括温度、压强、氧化时间等。

可以理解的是，不同的合金具有不同的物质组成，其暴露在各种测试条件下的氧化数据会得到非常复杂的氧化增重变化，给数据分析和氧化研究带来极大困难。由于氧化样本的实验成本非常高，特别是在特殊环境下的氧化数据，如超临界水、超临界  $\text{CO}_2$  等测试条件下，因此大量的进行对照实验又是不现实的。本实施例通过线性回归树分类器氧化动力学指数计算方法，研究了氧化动力学指数与合金样本中动力学特征的解析关系，具有简单快捷准确的优点。

首先基于氧化数据集构建编号为 #95 的根节点，并利用取对数处理后的氧化动力学方程对合金样本进行拟合，并且计算得到该节点对应的线性度值。可以理解的是，氧化数据集中还包括了由合金成分通过加法、减法和乘法进行随机组合生成的二次合金特征。最终拟合得到根节点的氧化动力学指数  $n=0.585$ ，拟合常数  $\ln(k)=-1.224$ ，计算得到的线性度值为  $LG=0.284$ ，小于线性度阈值 0.9，因此并未满足停止分支条件，需要执行动力学特征分化过程。

具体的，遍历根节点中合金样本的动力学特征和动力学特征值，例如(铁+镍)、(铬-铝+锰)、...、铁、镍、铬、铝、钴、锰、硅、钛、铜、碳、铋、温度、压强等动力学特征及其动力学特征值作为划分参数，将根节点中合金样本进行拆分得到第一候选集合和第二候选集合。利用氧化动力学方程对第一候选集合和第二候选集合进行拟合，得到对应的拟合结果，即氧化动力学拟合方程。最后根据第一拟合结果的第一线性度值，第二拟合结果的第二线性度值和父节点的总线性度值计算得到划分参数对应的线性增益值。

通过遍历比较，发现当动力学特征为铁元素，动力学目标特征值为 49.74wt.% 时，对父

节点进行分化的线性增益值最大。由图 10 可知，此时，总样本数量为 95，第一样本数量为 65，第二样本数量为 35，第一线性度值为 0.667，第二线性度值为 0.612，因此计算线性增益值对应为  $\Delta LG_{Fe,48.74wt.\%} = \left(\frac{60}{95} \times 0.667 + \frac{35}{95} \times 0.612\right) - 0.284 = 0.3627$  由此作为将铁元素作为目标动力学特征和其质量百分比 49.74wt.% 作为目标动力学特征值对父节点中合金样本进行拆分，95 个合金样本被拆分至编号为#60 的第一子节点和编号为#34 的第二子节点，其中节点编号的数值代表该节点中合金样本的数量。

由于第一子节点和第二子节点均未满足停止分化条件，因此将其作为父节点执行动力学特征分化过程，继续生长分支至端节点，最终得到九个端节点的氧化特征树。在一些实施例中，对端节点进行编号，从左往右以 NO\_0 开始。由图 11 可知，氧化动力学方程的线性度 LG 在端节点 No\_7 最小，为 0.76；在叶子 No\_5 最大，为 0.96。并发现了一个二次合金特征 (Co-(Al-Mn)) 在分化过程中被使用，说明对氧化动力学指数 n 有显著影响。

由此将 95 个合金样本划分至 9 个端节点中，每个合金样本都标记了其对应的氧化动力学指数值，如下表 4 所示。通过 gplearn 回归表 4 中合金样本，以氧化动力学指数作为回归目标，可以得到氧化动力学指数的解析方程，即  $n=f(\text{铁、镍、铬、铝、钴、锰、硅、钛、铜、碳、铋、温度、压强})$ ，本实施例对此不做限制。

表 4：特征和氧化动力学指数的数据对

	铁 (wt. %)	镍 (wt. %)	… (wt. %)	铋 (wt. %)	温度 ( $^{\circ}\text{C}$ )	压强 (bars)	氧化 时间 (h)	氧化动力 学指数 n
样本 1	0.07	59.5	…	0	650	200	6.21	1.465
…	…	…	…	…	…	…	…	…
样本 95	3	52.7	…	1.4	500	300	6.91	0.213

在材料技术领域，将机器学习与专家知识机理分析相结合具有重要意义。机器学习能够通过大规模数据分析，提取材料特性与性能之间的关联，加速材料发现和设计过程。例如，通过分析材料的组成、结构和处理条件等数据，机器学习可以预测材料的特性和性能。而专家知识机理分析则能够提供深入理解材料的基本原理和行为，为机器学习算法提供有针对性的指导和解释能力。

线性回归树分类器氧化动力学指数计算方法应用于多元合金的氧化数据，基于特征和目标的相关性构建了满足动力学方程的损失函数。从而可以方便的引入专家知识。在巨大的特征空间中，依赖数据对动力学方程描述的一致性，将满足不同物理机制的数据加以区分。可以识别影响该物理机制的主要驱动因素，构建特征和机制之间的映射关系，进而将特征的定义空间连续化。继而和符号回归、解释性算法等结合，在动力学框架下，解析地描述金属氧化这一物理过程。这对于氧化动力学方程的发现和修正，氧化过程描述、抗氧化材料机理研究和抗氧化性设计等任务具有重要意义。

可以理解的是，本申请实施例不局限于对于氧化动力学方程的研究，还可以直接应用于热力学中热激活过程的激活能分析。例如在节点通过热力学方程拟合数据满足的热激活过程，

$\hat{y} = -Q/RT$ ，其中是 $Q$ 激活能常数， $R$ 是理想气体常数， $T$ 是温度，本实施例对此不做限制。

本发明实施例还提供一种氧化动力学指数计算装置，可以实现上述氧化动力学指数计算方法，参照图 11 所示，在本申请一些实施例中，氧化动力学指数计算装置包括：

第一获取模块 100，用于获取预先构建的氧化特征树，氧化特征树为二叉树，二叉树包括多个节点和节点边，节点包括根节点和至少两个端节点，节点边存储有合金特征值，合金特征值是对合金数据划分的边界；

数据比较模块 200，用于从合金数据中依据合金特征数据划分节点，从根节点出发，根据合金特征数据与节点边上合金特征值的比较结果逐一确定目标节点边，直至到达端节点，将端节点确定为目标端节点；

指数获取模块 300，用于将目标端节点中存储的氧化动力学指数作为合金数据的氧化动力学指数。

参照图 12 所示，在本申请一些实施例中，氧化动力学指数计算装置还包括：

第二获取模块 400，用于获取氧化数据集；其中，氧化数据集包括多个合金样本，每个合金样本包括多个动力学特征和对应的动力学特征值；

分化模块 500，用于基于氧化数据集执行动力学特征分化过程，构建氧化特征树；动力学特征分化过程包括：

构建父节点；父节点存储合金样本；父节点的初始值为根节点，根节点基于氧化特征集构建；

遍历父节点中合金样本的动力学特征和动力学特征值，从中选取目标动力学特征和目标动力学特征值；

根据目标动力学特征和目标动力学特征值，将父节点中合金样本进行拆分，得到父节点的第一子节点和第二子节点，并将目标动力学特征值存储于对应的节点边；

确定第一子节点和/或第二子节点未满足停止分化条件，将第一子节点和/或第二子节点作为父节点，执行动力学特征分化过程。

解析模块 600，用于将端节点的氧化动力学指数和合金样本输入至符号回归模型；将氧化动力学指数作为回归目标，对合金样本中的动力学特征进行符号回归，得到氧化动力学指数的解析方程。

本实施例的氧化动力学指数计算装置的具体实施方式与上述氧化动力学指数计算方法的具体实施方式基本一致，在此不再一一赘述。

图 13 示出了本申请实施例提供的电子设备 1000。电子设备 1000 包括：处理器 1001、存储器 1002 及存储在存储器 1002 上并可在处理器 1001 上运行的计算机程序，计算机程序运行时用于执行上述的氧化动力学指数计算方法。

处理器 1001 和存储器 1002 可以通过总线或者其他方式连接。

存储器 1002 作为一种非暂态计算机可读存储介质，可用于存储非暂态软件程序以及非暂态性计算机可执行程序，如本申请实施例描述的氧化动力学指数计算方法。处理器 1001 通过运行存储在存储器 1002 中的非暂态软件程序以及指令，从而实现上述的氧化动力学指数计算方法。

存储器 1002 可以包括存储程序区和存储数据区，其中，存储程序区可存储操作系统、至少一个功能所需要的应用程序；存储数据区可存储执行上述的氧化动力学指数计算方法。此

外，存储器 1002 可以包括高速随机存取存储器 1002，还可以包括非暂态存储器 1002，例如至少一个储存设备存储器件、闪存器件或其他非暂态固态存储器件。在一些实施方式中，存储器 1002 可选包括相对于处理器 1001 远程设置的存储器 1002，这些远程存储器 1002 可以通过网络连接至该电子设备 1000。上述网络的实例包括但不限于互联网、企业内部网、局域网、移动通信网及其组合。

实现上述的氧化动力学指数计算方法所需的非暂态软件程序以及指令存储在存储器 1002 中，当被一个或者多个处理器 1001 执行时，执行上述的氧化动力学指数计算方法，例如，执行图 1 中的方法步骤 S101 至步骤 S104、图 2 中的方法步骤 S201 至步骤 S202 以及步骤 S301 至步骤 S304、图 3 中的方法步骤 S401 至步骤 S405、图 4 中的方法步骤 S501 至步骤 S506、图 5 中的方法步骤 S601 至步骤 S607，图 6 中的方法步骤 S701 至步骤 S703、图 7 中的方法步骤 S801 至步骤 S802、图 8 中的方法步骤 S901 至步骤 S902、图 9 中的方法步骤 S1001 至步骤 S1002。

本申请实施例还提供了一种存储介质，存储介质为计算机可读存储介质，该存储介质存储有计算机程序，该计算机程序被处理器执行时实现上述氧化动力学指数计算方法。存储器作为一种非暂态计算机可读存储介质，可用于存储非暂态软件程序以及非暂态性计算机可执行程序。此外，存储器可以包括高速随机存取存储器，还可以包括非暂态存储器，例如至少一个磁盘存储器件、闪存器件、或其他非暂态固态存储器件。在一些实施方式中，存储器可选包括相对于处理器远程设置的存储器，这些远程存储器可以通过网络连接至该处理器。上述网络的实例包括但不限于互联网、企业内部网、局域网、移动通信网及其组合。

本申请实施例提供的氧化动力学指数计算方法、装置、电子设备及存储介质，通过获取预先构建的氧化特征树，氧化特征树为二叉树，二叉树包括多个节点和节点边，节点包括根节点和至少两个端节点，节点边存储有合金数据值。然后从合金数据中依据合金特征数据划分节点，从氧化特征树的根节点出发，根据合金特征数据与节点边上合金特征值的比较结果逐一确定目标节点边，直至到达端节点，将端节点确定为目标端节点。最后将目标端节点中存储的氧化动力学指数作为该合金数据的氧化动力学指数。由此根据预先构建的氧化特征树，将不同合金成分对应的氧化动力学指数存储至端节点中，通过比较合金数据中的合金特征数据和氧化特征树节点边逐步确定目标端节点，可以准确计算获取氧化动力学指数和氧化动力学方程，对氧化过程描述、耐氧化材料机理研究和耐氧化性设计等任务具有重要意义，从而促进相关研究发展。

本申请通过最大化线性度增益将合金样本的氧化数据在特征空间做连续划分，使得同一个端节点上的合金样本的氧化数据可以通过同一个氧化动力学方程描述。得到所有端节点合金样本和其氧化动力学指数后，通过符号回归算法 `gplearn` 将所有端节点得到的氧化动力学指数表示为所研究特征的解析方程，继而通过一个统一的、解析的氧化动力学方程，用以描述不同合金在不同条件下的氧化情况。由此引入专家知识，在巨大的特征空间中，依赖数据对动力学方程描述的一致性，将满足不同物理机制的数据加以区分。可以识别影响该物理机制的主要驱动因素，构建特征和机制之间的映射关系，继而将定义空间连续化。和符号回归、解释性算法等结合，借助机器学习加速认知物理过程。本申请可用于，例如多元合金性能优化，氧化动力学方程的发现与修正，氧化过程描述，耐氧化材料机理研究和耐氧化性设计等任务之中。本申请是一种基于氧化动力学关系的机器学习数据分析方法，并在相关的数据评

估中证实了本方法用于发现和强化数据之间关联、分析合金氧化机制的可行性。

以上所描述的实施例仅仅是示意性的，其中作为分离部件说明的单元可以是或者也可以不是物理上分开的，即可以位于一个地方，或者也可以分布到多个网络单元上。可以根据实际的需要选择其中的部分或者全部模块来实现本实施例方案的目的。

本领域普通技术人员可以理解，上文中所公开方法中的全部或某些步骤、系统可以被实施为软件、固件、硬件及其适当的组合。某些物理组件或所有物理组件可以被实施为由处理器，如中央处理器、数字信号处理器或微处理器执行的软件，或者被实施为硬件，或者被实施为集成电路，如专用集成电路。这样的软件可以分布在计算机可读介质上，计算机可读介质可以包括计算机存储介质（或非暂时性介质）和通信介质（或暂时性介质）。如本领域普通技术人员公知的，术语计算机存储介质包括在用于存储信息（诸如计算机可读指令、数据结构、程序模块或其他数据）的任何方法或技术中实施的易失性和非易失性、可移除和不可移除介质。计算机存储介质包括但不限于 RAM、ROM、EEPROM、闪存或其他存储器技术、CD-ROM、数字多功能盘（DVD）或其他光盘存储、磁盒、磁带、储存设备存储或其他磁存储装置、或者可以用于存储期望的信息并且可以被计算机访问的任何其他的介质。此外，本领域普通技术人员公知的是，通信介质通常包括计算机可读指令、数据结构、程序模块或者诸如载波或其他传输机制之类的调制数据信号中的其他数据，并且可包括任何信息递送介质。

还应了解，本申请实施例提供的各种实施方式可以任意进行组合，以实现不同的技术效果。以上是对本申请的较佳实施进行了具体说明，但本申请并不局限于上述实施方式，熟悉本领域的技术人员在不违背本申请精神的共享条件下还可作出种种等同的变形或替换。



# 说明书附图

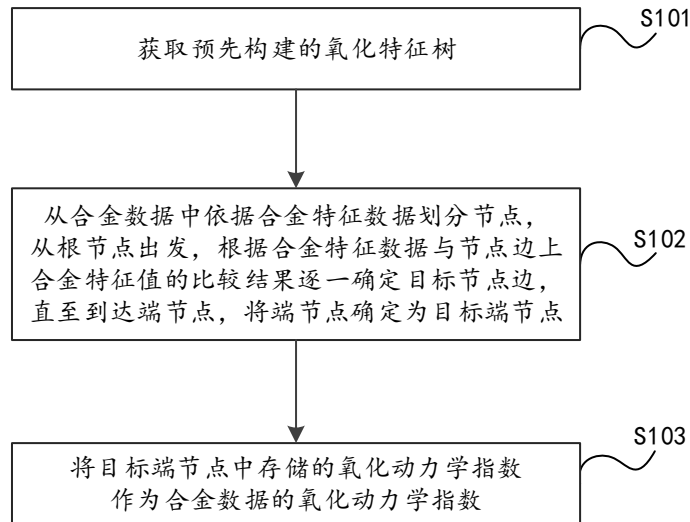


图 1

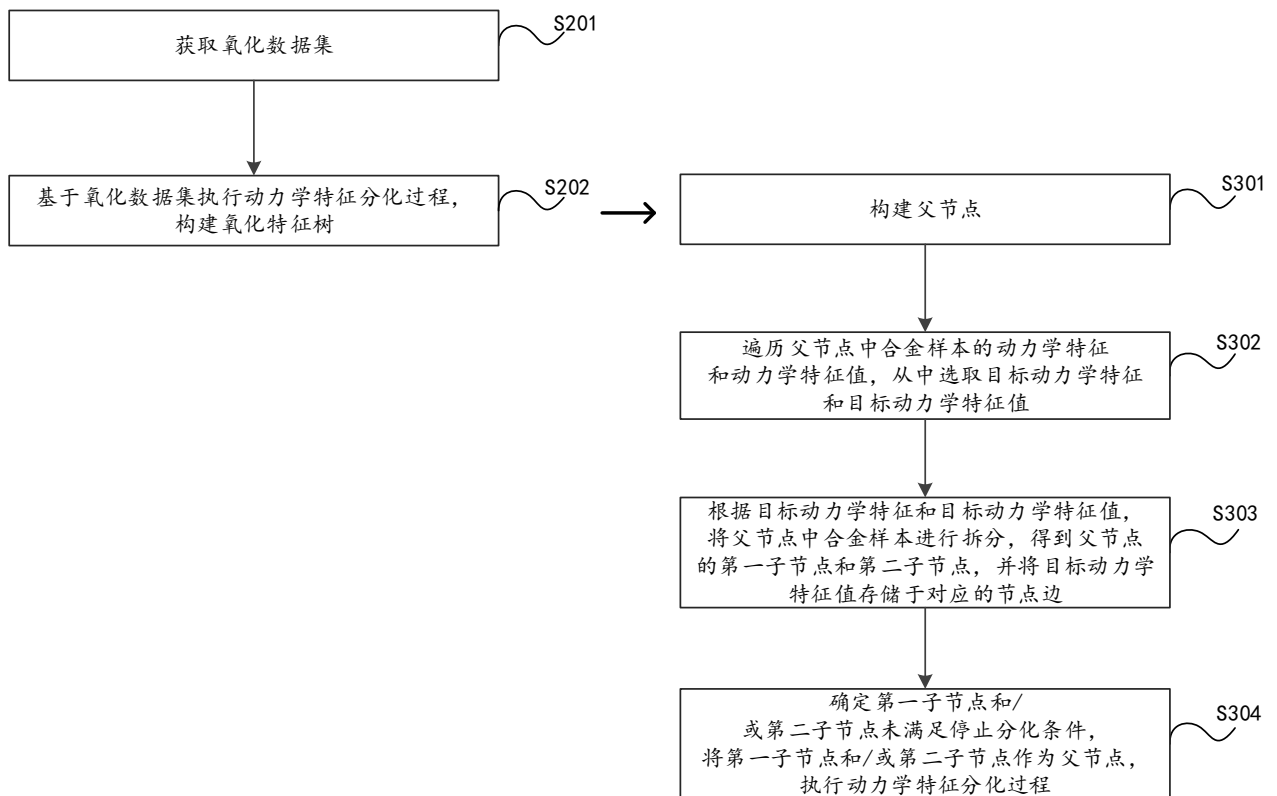


图 2

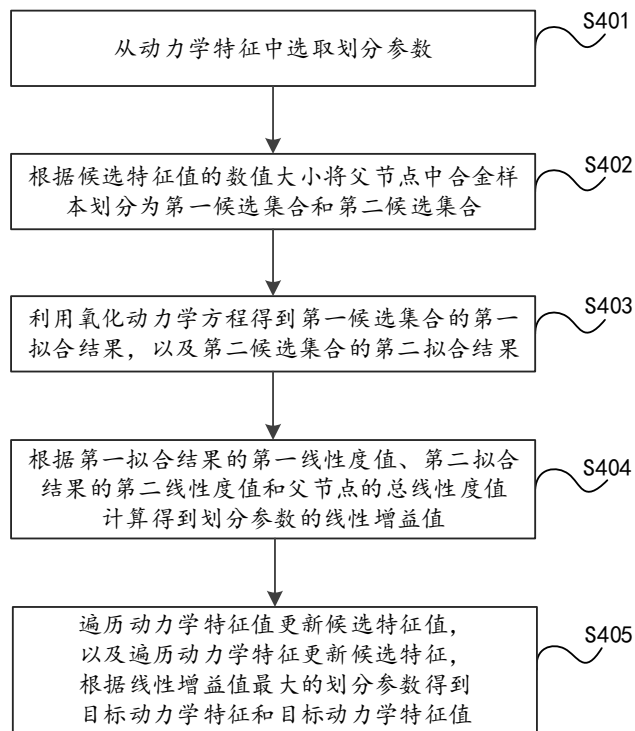


图 3

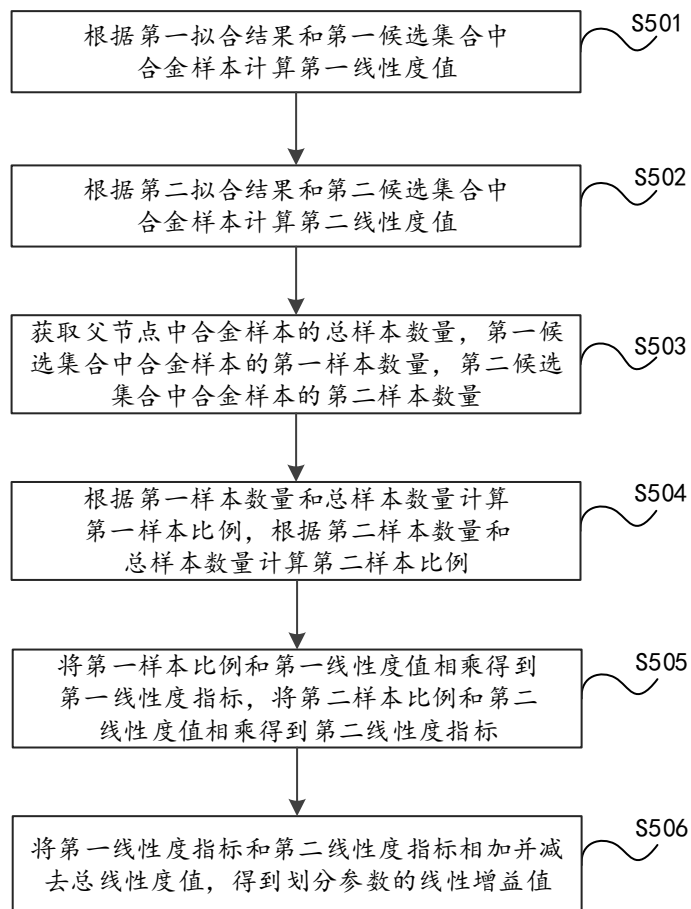


图 4

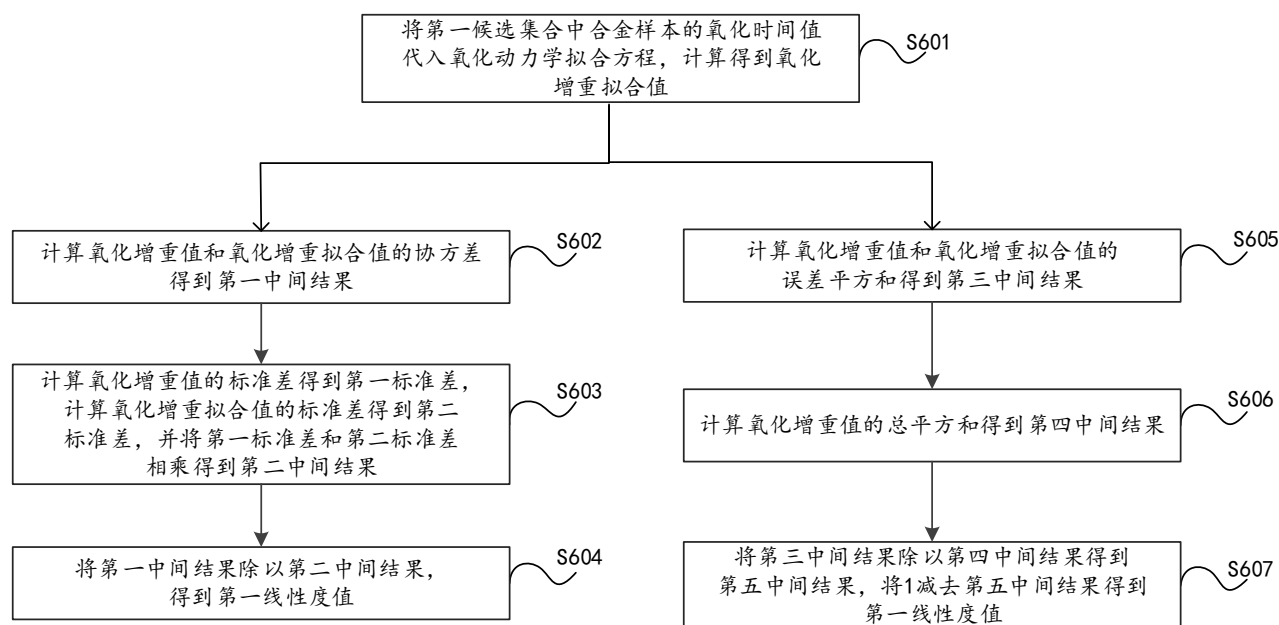


图 5

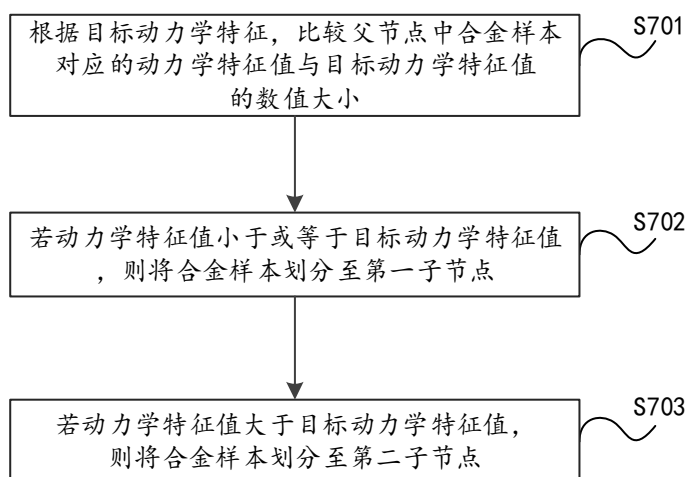


图 6

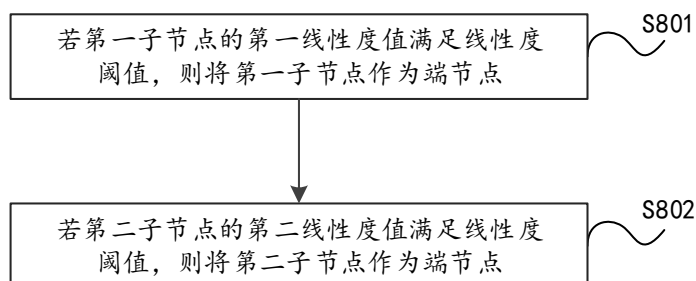


图 7

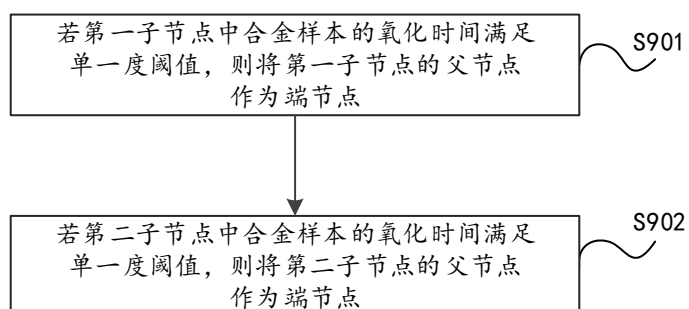


图 8

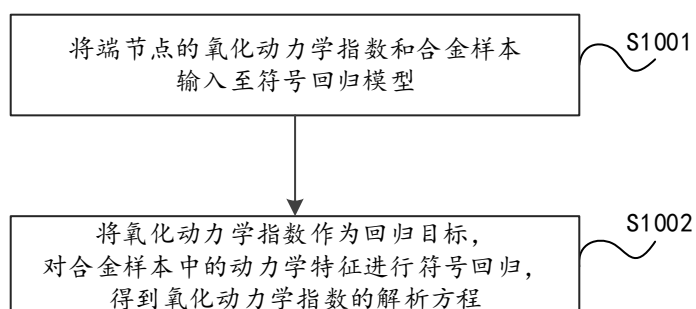


图 9

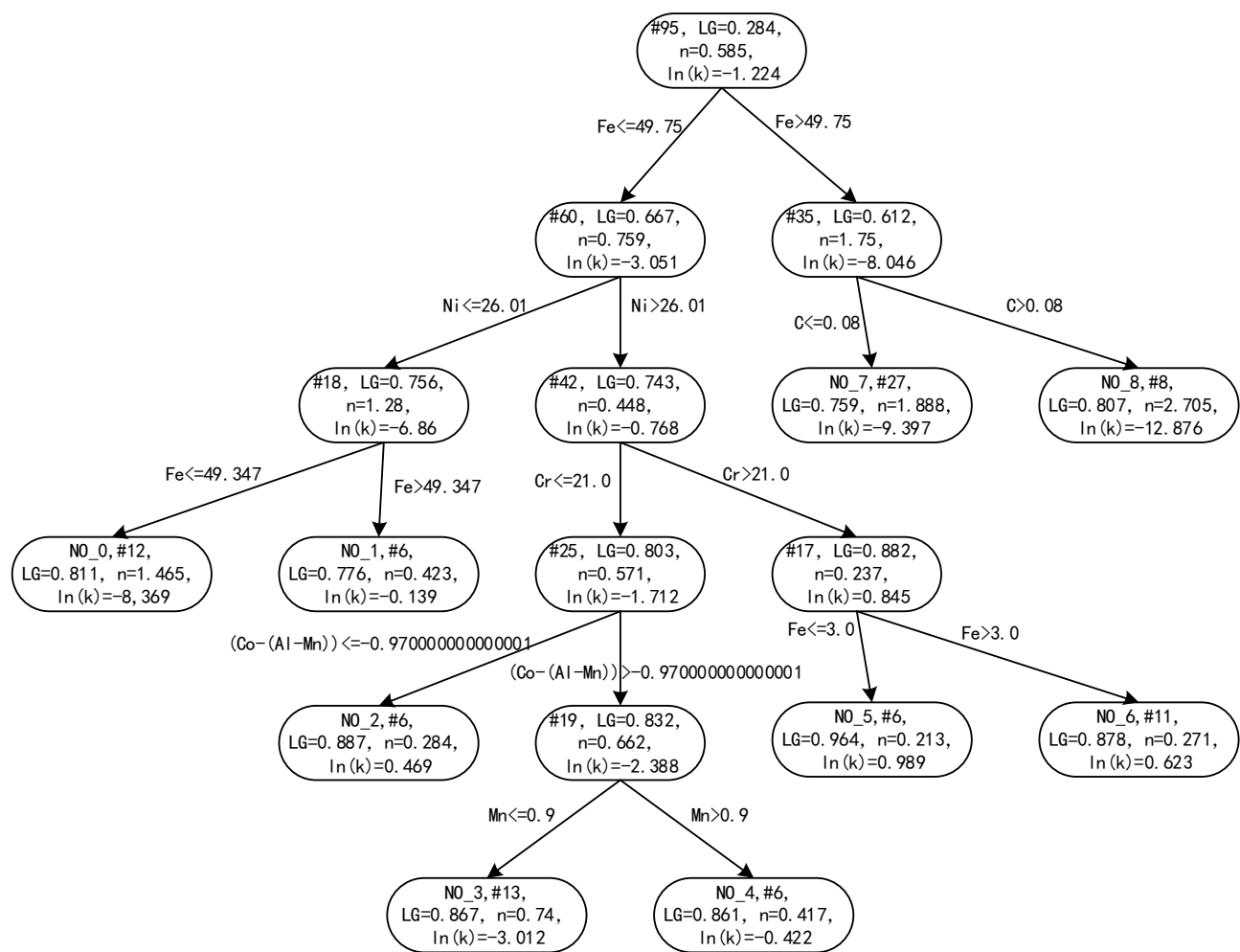


图 10

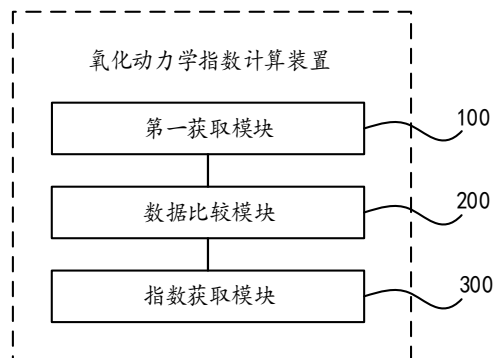


图 11

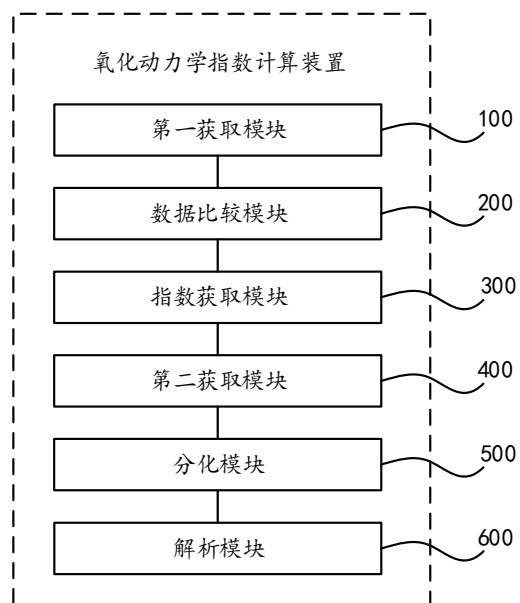


图 12

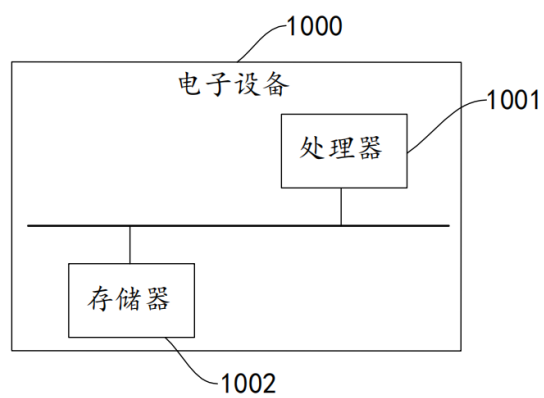


图 13

## 说明书摘要

---

本申请公开了氧化动力学指数计算方法、装置、电子设备及存储介质，涉及合金技术领域。通过获取预先构建的氧化特征树，氧化特征树为二叉树，包括节点和节点边，节点包括根节点和端节点，节点边存储有合金数据值。然后从合金数据中依据合金特征数据划分节点，从根节点出发，根据合金特征数据与节点边上合金特征值的比较结果逐一确定目标节点边，直至到达端节点，将端节点确定为目标端节点。最后将目标端节点中的氧化动力学指数作为该合金数据的氧化动力学指数。由此根据预先构建的氧化特征树，可以准确计算获取氧化动力学指数和氧化动力学方程，对氧化过程描述、耐氧化材料机理研究和耐氧化性设计等任务具有重要意义，从而促进相关研究发展。

# 向外国申请专利保密审查请求书

				第①和②栏由国家知识产权局填写		
③请求内容 根据专利法第 19 条第 1 款的规定，拟就在中国完成的发明或实用新型向外国申请专利，请求进行保密审查。				① 请求号：		
				② 递交日：		
专利申请		⑤ 申请人（第一署名人） 香港科技大学（广州）		⑥ 申请号		
直接向外国申请专利	⑦ 请求人	请求人 1	姓名或名称			
			电话		邮政编码	
			详细地址			
		请求人 2	姓名或名称			
			电话		邮政编码	
			详细地址			
	⑧ 发明人					
	⑨ 收件人	姓 名		电话	电子邮箱	
		邮政编码		通信地址		
	⑩ 专利代理机构	专利代理机构名称			机构代码	
		代理 师 (1)	姓 名		代理 师 (2)	姓 名
			执业证号			执业证号
			电 话			电 话
	⑪ 附件清单 【附件名称】 已备案的证明文件备案编号：__					
	⑫ 全体申请人（请求人）或专利代理机构 广州嘉权专利商标事务所有限公司					



# 发 明 专 利 请 求 书

用户案卷号 P23GZ1NN05592CN

此框内容由国家知识产权局填写

④ 发明 名称	氧化动力学指数计算方法、装置、电子设备及存储介质			①申请号 ②分案提交日 ③申请日
⑤ 发 明 人	发 明 人 (1)	姓 名 曹斌	<input type="checkbox"/> 不公布姓名	
		国籍或地区 中国	居民身份证件号码 140602199705061733	
	发 明 人 (2)	姓 名 张统一	<input type="checkbox"/> 不公布姓名	
		国籍或地区	居民身份证件号码	
	发 明 人 (3)	姓 名 熊杰	<input type="checkbox"/> 不公布姓名	
		国籍或地区	居民身份证件号码	
⑥ 申 请 人	<input checked="" type="checkbox"/> 全体申请人请求费用减缴且已完成费用减缴资格备案			
	申 请 人 (1)	姓名或名称 香港科技大学（广州）		申请人类型 大专院校
		国籍或注册国家（地区） 中国		电子邮箱
		居民身份证件号码或统一社会信用代码 12440100MB2E09933F		
		经常居所地或营业所所在地 中国		电话
		详细地址 广东省广州市南沙区笃学路 1 号		邮政编码 511453
	申 请 人 (2)	姓名或名称		申请人类型
		国籍或注册国家（地区）		电子邮箱
		居民身份证件号码或统一社会信用代码		
		经常居所地或营业所所在地		电话
		详细地址		邮政编码
	申 请 人 (3)	姓名或名称		申请人类型
		国籍或注册国家（地区）		电子邮箱
		居民身份证件号码或统一社会信用代码		
		经常居所地或营业所所在地		电话
		详细地址		邮政编码
	⑦ 联 系 人	姓 名		电 话
		邮政编码		电子邮箱
详细地址				

# 发 明 专 利 请 求 书

⑧代表人为非第一署名申请人时声明					特声明第 <u>1</u> 署名申请人为代表人				
⑨ 专 利 代 理 机 构	<input checked="" type="checkbox"/> 声明已经与申请人签订了专利代理委托书且本表中的信息与委托书中相应信息一致								
	名称 广州嘉权专利商标事务所有限公司						机构代码 44205		
	代 理 师 (1)	姓 名 余凯欢			代 理 师 (2)	姓 名			
		执业证号 4420551890.5				执业证号			
		电 话 020-66360744				电 话			
⑩ 分案申请		原申请号			针对的分案申请号		原申请日_年_月_日		
⑪ 生物材料样品		保藏单位代码					是否存活 <input type="checkbox"/> 是 <input type="checkbox"/> 否		
		保藏日期_年_月_日			保藏编号		分类命名		
⑫ 序列表		<input type="checkbox"/> 本专利申请涉及核苷酸或氨基酸序列表							
⑬ 遗传资源		<input type="checkbox"/> 本专利申请涉及的发明创造是依赖于遗传资源完成的							
⑭ 要 求 优 先 权 声 明	序号	原受理机构名称			在先申请日		在先申请号		
	1								
	2								
	3								
	4								
	5								
⑮ 不丧失新颖性宽限期声明		<input type="checkbox"/> 已在国家出现紧急状态或者非常情况时，为公共利益目的首次公开 <input type="checkbox"/> 已在中国政府主办或承认的国际展览会上首次展出 <input type="checkbox"/> 已在规定的学术会议或技术会议上首次发表 <input type="checkbox"/> 他人未经申请人同意而泄露其内容							
⑯ 同日申请		<input type="checkbox"/> 声明本申请人对同样的发明创造在申请本发明专利的同日申请了实用新型专利							
⑰ 提前公布		<input checked="" type="checkbox"/> 请求早日公布该专利申请							
⑱ 请求实质审查		<input checked="" type="checkbox"/> 根据专利法第 35 条的规定，请求对该专利申请进行实质审查。 请求对本申请延迟审查，延迟期限为 <input type="checkbox"/> 1 年 <input type="checkbox"/> 2 年 <input type="checkbox"/> 3 年 <input type="checkbox"/> 申请人声明，放弃专利法实施细则第 51 条规定的主动修改的权利。							

# 发 明 专 利 请 求 书

⑲ 摘要附图	指定说明书附图中的图 <u>10</u> 为摘要附图。	
<p>⑳ 申请文件清单</p> <p>1.发明专利请求书 共 5 页</p> <p>2.权利要求书 共 4 页</p> <p>3.说明书 共 20 页</p> <p>4.说明书附图 共 6 页</p> <p>5.说明书摘要 共 1 页</p> <p>权利要求的项数 14 项</p>		<p>㉑ 附加文件清单</p> <p>1.向外国申请专利保密审查请求书 共 1 页</p> <p>2.实质审查请求书 共 1 页</p> <p>证明文件备案编号__</p> <p>总委托书(编号 ZW0123054223)</p>
<p>㉒ 代表人或专利代理机构</p> <p>广州嘉权专利商标事务所有限公司</p>		

# 发 明 专 利 请 求 书 外 文 信 息 表

发明名称		
发明人姓名	发明人 1	
	发明人 2	
	发明人 3	
申请人名称及地址	申请人 1	名称 地址
	申请人 2	名称 地址
	申请人 3	名称 地址

## 附 页

### 【发明人】

发明人(4)	姓名：黄加强	<input type="checkbox"/> 不公布姓名
	国籍或地区：	居民身份证件号码：

### 【发明人外文信息】

发明人 4	
-------	--

# 实 质 审 查 请 求 书

① 专 利 申 请	申请号	
	发明创造名称 氧化动力学指数计算方法、装置、电子设备及存储介质	
	申请人（第一署名人）香港科技大学（广州）	
②请求内容：  根据专利法第 35 条的规定，请求对上述专利申请进行实质审查。		
③放弃主动修改权利	<input type="checkbox"/> 申请人声明，放弃专利法实施细则第 51 条规定的主动修改的权利。	
④请求延迟审查	请求对本申请延迟审查，延迟期限为 <input type="checkbox"/> 1 年 <input type="checkbox"/> 2 年 <input type="checkbox"/> 3 年	
⑤附件清单  已备案的证明文件备案编号：__		
⑥备注 <input type="checkbox"/> 该申请为 PCT 国际申请，已由中国作出国际检索报告及专利性国际初步报告，实质审查费减免 100% <input type="checkbox"/>		
⑦代表人或专利代理机构 广州嘉权专利商标事务所有限公司		