项目编号: 密级:

国家重点研发计划项目中期 执行情况报告

| 项目名称: | | | | | |
|--------------------|----|----|---|---|--|
| 所属专项: | | | | | |
| 项目负责人: <u>(签字)</u> |) | | | | |
| 项目牵头单位: <u>(公</u> | 章) | | | | |
| 项目管理专业机构: | | | | | |
| 执行期限: | 年 | 月至 | 年 | 月 | |

中华人民共和国科学技术部制 20 年 月 日

编报要求

一、内容说明

项目中期执行情况报告着重从组织实施角度,围绕项目任务书的内容报告项目中期重要进展情况,具体包括项目的总体目标及考核指标实现程度,一体化组织实施及管理运行情况,人员、资金等支撑条件落实情况,项目和各课题经费使用情况等,并报告中期执行过程中的重大事项及突出进展。

二、格式要求

文字简练;报告的密级一般与任务书规定的密级相同;报告 文本统一用 A4 幅面纸,文字内容一律通过"国家科技管理信息 系统公共服务平台"在线填报;报告文本第一次出现外文名称时 要写清全称和缩写,再出现时可以使用缩写。

三、编制程序及时间要求

项目中期检查前,由项目牵头单位组织项目参与单位编制项目中期执行情况报告,经项目负责人及项目牵头单位审核后,按

照填报项目任务书时的用户名和密码,登陆国家科技管理信息系统公共服务平台(http://service.most.gov.cn/)在线填写,并由单位管理员审核提交专业机构审核确认。填报完毕后,打印装订,由项目负责人签字,项目牵头单位盖章后,报送专业机构。

涉密项目中期执行情况报告不得在线填写,请在国家科技管理信息系统公共服务平台下载文档模板,并按照保密规定进行填写、打印及报送。

编写大纲

- 一、总体进展情况
- 1.项目中期总体进展情况

对照项目任务书的计划目标和各项主要指标要求,简要阐明项目中期进展情况,评述项目中期任务的实施进展状态。

1.1 项目年度计划及指标要求

| 年度 | 任务 | 考核指标 | 成果形式 |
|--------------------|--|--------------------------------------|-----------------------------|
| 2017年7月-2018年6月 | 收集与存储已有镍基单晶高温 合金材料计算数据;开发主动学 习的多层级交互式特征选择方 法,定性定量分析各种因素对性 能的影响程度 | 实践机器学习及数据挖掘方法,为提取"数据关联"规律作准备 | 提出一份提取已知单晶高温合金中的数据关联规律的初步报告 |
| 2018年1月-2019年6月 | 使用机器学习方法挖掘高温合金数据,根据不同的学习目标自适应地构造出多种学习器混合预测模型,提高对性能的预测精度 | 开展以机器学习 及数据挖掘为重 点的数据关联分 析 | 研发相关数据 分析软件 |
| 2019 年 7 月-2020年6月 | 基于数据关联分析计算,提取规律构建高通量并发式计算数据分析与管理软件 | 重点为发展机器 学习及数据挖掘 方法提出数据关 联规律 | 研究报告及计 算软件 |

2020 年 1 月 研究基于规则抽取的可解释性 -2020年12月 方法,将机器学习学到的结果转 法用于解析关联 文 为易于理解的 if-then-else 规则, 提高预测方法的可解释性

发展机器学习方 分析

研究报告或论

1.2 项目总体进展情况

我组的基本任务是针对单晶高温合金材料高通量并发式集成计算的数据中蕴含的 复杂的数据关联,引入机器学习及数据挖掘方法对其内在相关性进行分析,探索高温 合金材料性能预测方法、数据关联表征方法。面向高通量计算数据,发展实现复杂数 据分析与管理软件。因此,本课题组紧紧围绕我们的基本任务,从数据、算法、应用 与平台四个方面展开了系统的研究, 采集到来自王院士 49 篇文献中的单晶高温合金计 算、实验数据、来自文献 / 专利的蠕变性能数据和四年一届国际高温合金会议文献中 合金成分-结构-工艺-性能数据,为机器学习做好数据准备;制定了一套数据挖掘与机 器学习算法规范, 初步完成机器学习/数据挖掘算法库的研发, 并针对高温合金数据 特点,研发了多层级交互性特征分析方法,定性定量分析各种因素对高温合金性能的 影响程度;基于以上研究,研发了高温合金机器学习演示平台。工作进展情况如图 1 所示。

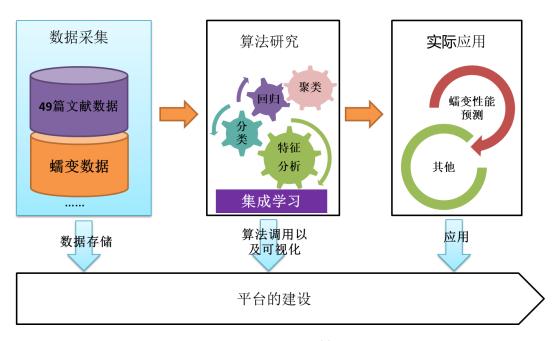


图 1 项目总体进展情况

1.2.1 高温合金数据采集和存储

(1) 王院士 49 篇文献数据的分类与存储

我组完成了王院士 49 篇文献的精读,并对 49 篇文献进行了分类,其中研究原子 占位与分配 7 篇,力学性能 12 篇,原子扩散 3 篇,错配位错、位错网络、位错运动 19 篇,结构和界面 10 篇。我们收集了每一篇文献中存在的各类数据,包括图片数据 142 条、规则数据 89 条、文献信息数据 49 条(49 篇文献)以及表结构数据 235(高温合金性能数据);同时,也对 49 篇文献出现的高温合金性能描述因子进行了归纳和分类,主要分为以下 4 大类:合金化元素占位和相分配(晶格常数、结合能、占位形成能、原子择位能等);错配位错、相界面裂纹、位错运动(裂纹方向、晶格捕获上限、晶格错配度等);扩散(空位形成能、原子迁移能);力学性能(弹性刚度常数、杨氏模量、剪切模量等),如图 2所示。

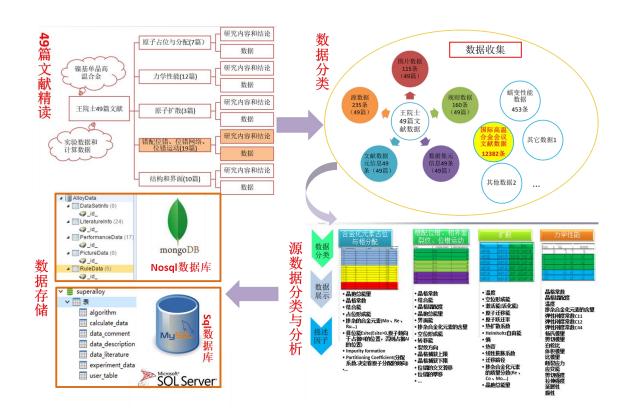


图 2 王院士 49 篇文献数据采集、分类与存储

(2) 蠕变性能数据的采集与存储

另外, 我组也通过查阅大量文献, 从表 2 中列出的文献和专利中采集了镍基单晶高温合金的成分-工艺-蠕变性能数据 453 条, 部分数据如表 3 所示。

表 2 镍基单晶高温合金蠕变相关文献和专利

| 编号 | 作者 | 所属机构 | 中文名 |
|------------|--|------------------------|----------------|
| US5888451A | Maxim KonterMichael NewnhamChristoph Tonnes | ABB Research Ltd | ABB 研究有限公司(瑞士) |
| US4885216A | Subhash K. Naik | Avco Corp | 阿夫科公司(美国) |
| US5399313A | Earl W. RossCarl S. WukusickWarren T. King | General Electric Co | 通用电气公司(美国) |
| US5100484A | Carl S. WukusickLeo Buchakjian, Jr.Ramgopal | | 通用电气公司(美国) |

| | | Darolia | | |
|--------------|--------------|---|---|----------------------|
| US00605 | 51083A | Hideki Tamaki | Hitachi Metals | 日立金属(日本) |
| US47658 | 850A | Frederick A. Schweizer | Honeywell International Inc | 霍尼韦尔国际公司(德国) |
| US50770 | 004A | Frederick A. SchweizerXuan Nguyen-Dinh | Honeywell International Inc | 霍尼韦尔国际公司(德国) |
| US42070 | 098A | Stuart W. Shaw | Huntington Alloys Corp | 亨廷顿合金公司(英国) |
| US59251 | 198A | Niranjan Das | India Defence Ministry of Research and Development Organization | 印度国防部研究与发展组 织(印度) |
| US47071 | 192 A | \mathcal{E} | National Research Institute for Metals | 国家金属研究所(日本) |
| US46295 | 521A | Gernant E. MaurerWilliam J. BoeschJean M. Theret | Special Metals Corp | 特种金属公司(美国) |
| US42093 | 348A | David N. DuhlWalter E. Olson | United Technologies Corp | 联合技术公司(美国) |
| US42227 | 794A | Frederick A. SchweizerDavid N. Duhl | United Technologies Corp | 联合技术公司(美国) |
| US43714 | 404A | David N.DuhlXuan Nguyen-Dinh | United Technologies Corp | 联合技术公司(美国) |
| US47190 A | 080A80 | David N. DuhlAlan D. Cetel | United Technologies Corp | 联合技术公司(美国) |

| US4908183A | Stephen ChinDavid N. Duhl | United Technologies | 联合技术公司(美国) |
|------------|---------------------------|------------------------|------------|
| | | Corp | |

表 3 镍基单晶高温合金蠕变性能部分数据

| Alloy | Ni_wt | Re_wt | Co_wt | Al_wt | Ti_wt | V_vt | Mo_wt | Cr_wt | Ta_wt | C_wt | B_wt | Y_wt | Nb_wt | 20 | solutio n_treat ment_ti me | p_aging | 2nd_step _aging_t reatment _time | _treatme | lst_step _aging_t reatment _tempera _ture | _aging_t reatment | temperat ure | applied_ Stress | creep_li |
|-------|----------|-------|-------|-------|-------|------|-------|-------|-------|-------|-------|--------|-------|------|-------------------------------------|---------|---|----------|---|----------------------|-----------------|--------------------|----------|
| 1 | 59.885 | 0 | 10 | 5 | 2 | 12 | 0 | 9 | 0 | 0.1 | 0.015 | 0 | 0 | 2 | 4 | 4 | 32 | 1204 | 1080 | 870 | 1093 | 138 | 30 |
| 2 | 65.146 | 3.1 | 7.5 | 5.9 | 1.5 | 0 | 3, 65 | 8 | 5 | 0.05 | 0.004 | 0 | 0 | 0.15 | 2 | 4 | 16 | 1307 | 1080 | 898 | 1148 | 90 | 30 |
| 3 | 67.281 | 3 | 5 | 6 | 1 | 3 | 1.5 | 7 | 6 | 0.004 | 0.05 | 0.015 | 0 | 0.15 | 2 | 4 | 16 | 1307 | 1080 | 898 | 1093 | 138 | 30.2 |
| 4 | 64, 2945 | 3 | 7.5 | 6.5 | 0 | 3 | 1.5 | 8 | 6 | 0.05 | 0.004 | 0.0015 | 0 | 0.15 | 2 | 4 | 16 | 1307 | 1080 | 898 | 1093 | 138 | 31.6 |
| 5 | 62.5 | 0 | 5 | 5 | 1.5 | 4 | 0 | 10 | 12 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 4 | 4 | 32 | 1285 | 1080 | 870 | 982 | 248.4 | 33 |
| 6 | 67.281 | 3 | 5 | 6 | 1 | 3 | 1.5 | 7 | 6 | 0.004 | 0.05 | 0.015 | 0 | 0.15 | 2 | 4 | 16 | 1307 | 1080 | 898 | 871 | 552 | 35.1 |
| 7 | 63.896 | 6 | 7.5 | 6.4 | 0 | 2 | 0 | 8 | 6 | 0.05 | 0.004 | 0 | 0 | 0.15 | 2 | 4 | 16 | 1307 | 1080 | 898 | 1093 | 138 | 35.4 |
| 8 | 64. 2945 | 3 | 7.5 | 6.5 | 0 | 3 | 1.5 | 8 | 6 | 0.05 | 0.004 | 0.0015 | 0 | 0.15 | 2 | 4 | 16 | 1307 | 1080 | 898 | 1148 | 90 | 39.2 |
| 9 | 62.5 | - 0 | 5 | 5 | 1.5 | 4 | 0 | 10 | 12 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 4 | 4 | 32 | 1285 | 1080 | 870 | 871 | 517.5 | 40 |
| 10 | 64.896 | 3 | 7.5 | 6.5 | 1 | 3 | 0.5 | 5 | 8 | 0.004 | 0.05 | 0.05 | 0 | 0.5 | 2 | 4 | 16 | 1307 | 1080 | 898 | 1093 | 138 | 42.3 |

(3) 国际高温合金会议文献中成分-结构-工艺-性能数据的采集、分

类与存储

为了采集更多的镍基单晶高温合金性能数据,更为准确地探索和揭示出合金成分结构-工艺-性能之间的关系。我组采纳了王院士的建议,检索和下载了每四年一次的国际高温合金会议相关论文集。我们还通过北京科技大学尹海清老师的**国家材料数据共享平台**获得了**四年一届国际高温合金会议文献**中的所有数据,并在我们的平台中进行了存储,经过数据清洗、数据预处理后,目前已获得高温合金数据 **12382** 条。数据详细情况如图 3 所示,其中主要包括力学性能数据 7433 条,蠕变性能数据 3310 条,物理性能数据 536 条,热学性能数据 413 条,化学性能数据 597 条,其他 93 条。

我组专门对高温合金会议文献中蠕变性能数据进行了详细解读,并将影响蠕变性能的描述符(材料特征)划分为合金成分、热处理工艺、铸造工艺、试验条件和合金微观组织等五大类,如图 4所示。对每一类别蠕变描述符(特征)影响蠕变行为的机理进行如下的分析与总结: ① 合金化元素: 20%左右的 Co、Cr、Mo、Ru、Re 等难熔合金元素的添加很大程度上提升合金的组织稳定性和蠕变性能。然而,一方面 Re、Ru 元素的掺杂提高了合金的成本,另一方面难熔元素的大量添加容易造成铸造缺陷的

形成,不利于合金力学性能的提高,C、B 和 Hf 等微量元素,可以强化晶界,改善 γ 相的形貌有助于提高合金的蠕变性能和持久寿命;② 合金的微观组织结构: γ'相的尺寸和体积分数和形态与合金的蠕变性能密切相关。③ 蠕变实验测试条件;④ 热处理工艺直接影响着 γ'相的形态、尺寸和体积分数,进而对合金的持久性能和蠕变性能产生影响;⑤ 铸造工艺的合理与否决定着铸件上是否会出现缩孔、缩松、变形、裂纹等缺陷

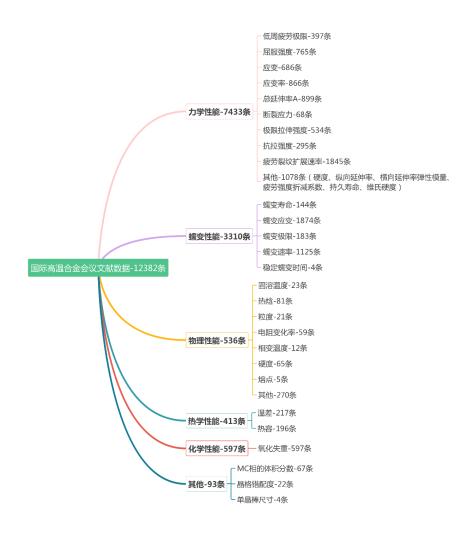


图 3 国际高温合金会议文献数据概况

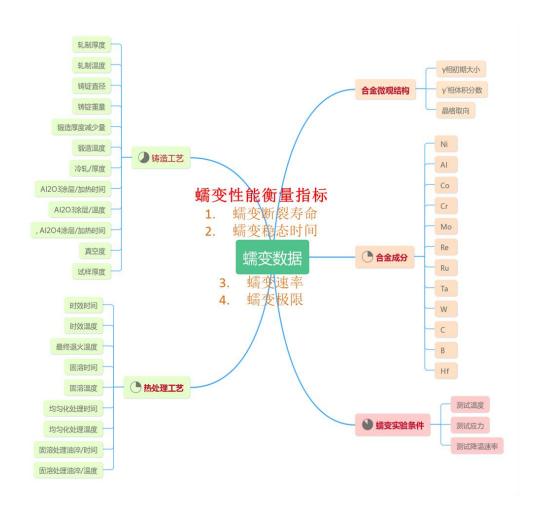


图 4 国际高温合金会议文献蠕变性能描述符的归纳与分类

1.2.2 面向蠕变性能的数据关联分析与预测

(1) 结合领域专家知识的多层级交互特征分析方法

目前的特征选择算法选择特征时存在不稳定性,可能会剔除专家认为关键的特征给剔除掉,这一方面可能会影响材料领域专家对新属性的计算;另一方面也可能降低机器模型的预测精度。因此在进行特征选择时,需要综合考虑领域专家经验、机器学习模型的预测精度等因素,协同完成特征分析。因此课题组针对上述问题,提出并完

— 11 —

成了结合领域专家知识的多层级交互特征分析方法,流程如图 5所示。针对高温合金数据可能存在的稀疏性、冗余性、不相关性、高维度等问题展开了逐层的特征分析,初步设计了与实现了专家经验的表示和融入方法,特征分析的阈值确定以及算法筛选条件的学习,模型选择和多目标评价函数的确定,并设计了特征重要性集成方法。利用该方法可以定性定量分析各种因素对高温合金性能的影响程度。

多层级交互式特征分析方法集成了多领域专家的知识和经验,并对特征分析得到的结果采用机器学习模型进行验证。算法、模型验证、领域专家经验三者共同保证筛选特征子集的质量。该方法在获得最优特征子集的同时,也能有效的分析属性与属性之间的关联关系,属性与性能之间的因果关系。

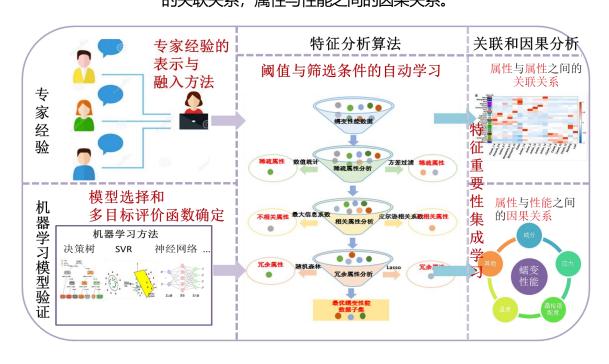


图 5 结合领域专家知识的多层级特征分析方法

为了验证我们提出的特征分析方法的有效性和可行性,我们将计算好蠕变新属性的78条蠕变性能数据作为学习样本,样本成分维度14维,包括Ni,Re,Co,Al,Ti,W,Mo,Cr,Ta,C,B,Y,Nb,Hf各元素的质量分数,热处理维度6维,包括固溶温度、固溶时间、

第一阶段时效处理温度、第二阶段时效处理温度、第一阶段时效处理时间、第二阶段时效处理时间,外部条件维度 2 维,包括外部温度、外部应力,目标属性(蠕变断裂寿命)1 维,计算新属性 5 维,包括 γ'相摩尔分数、堆垛层错能、晶格常数、剪切模量、晶格扩散系数。

首先,我们对样本数量为 78 条,描述因子有 27 个的蠕变性能数据进行稀疏属性分析。稀疏属性指的是当属性值为离散值时比如 0.1,如果其中某个离散值的数量超过总数量的 95%,说明该离散值对应的属性为稀疏属性;当属性值为连续值时,如果属性值的方差小于给定阈值时,也说明该属性为稀疏属性。通过稀疏属性分析可以过滤一些稀疏属性,使得各个属性值的分布尽可能均匀,从而为后续的数据分析提供良好质量的数据,提高机器学习的预测精度。如图 5 所示,根据专家经验,稀疏值阈值设定为 95,从左图可以看出 Y(钇)元素的质量分数和 2sat(二阶段时效处理时间)这两个离散属性的稀疏值大于 95,因此它们都是稀疏属性。依据专家经验,属性方差阈值设定为 0.01,从右图中可看出所有连续属性方差都大于 0.01,因此保留全部的连续属性。稀疏属性分析后,保留了 25 个属性。

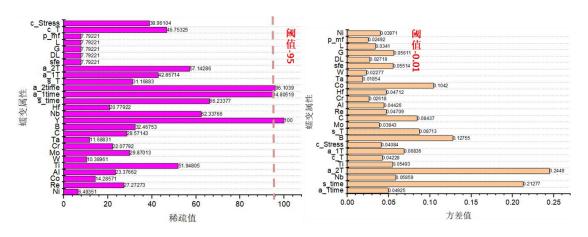


图 6 稀疏属性分析结果

其次,蠕变性能数据在经过稀疏属性分析后,虽然消除了特征集中存在的稀疏信息,但特征集中仍然可能存在不相关信息、冗余信息。因而我们对蠕变数据做了相关属性分析。相关属性分析可以过滤无关或弱相关的属性,保留最相关的属性,使得条件属性与决策属性之间的相关性较强,从而为后续的数据分析提供良好质量的数据,提高机器学习的预测精度。从图 7中可以看出,固溶处理中,s_time(固溶处理时间)的相关系数最高为 0.63, s_T(固溶温度)的相关系数为 0.36。

合金化元素中,相关系数比较高的是 Co(0.43) Nb(0.34) Al(0.3) Re(0.3)。微观属性中,剪切模量 G 的相关系数为 0.4,层错能 sfe 为 0.32,扩散系数 DL 为 0.29,晶格常数 L 为较低的 0.08 这里和蠕变关系比较大的外部应力 c_Stress 的相关系数为 0.04,因为 78 条样本中,大部分的应力是相同的。依据专家经验,相关系数阈值设定为 0.02,从 左图可以看出,所有的蠕变属性(25 个)与决策属性(蠕变断裂寿命)之间的相关系数都大于 0.02,因此保留了全部属性。

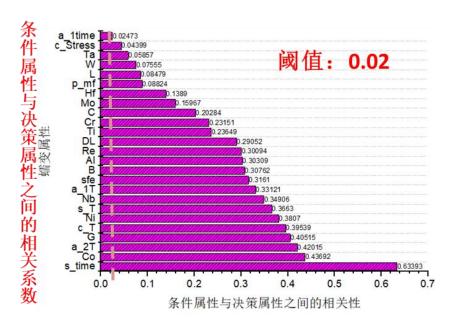


图 7 相关属性分析

最后,蠕变属性与属性之间也可能存在较强的相关性,称为冗余性。我们通过冗余属性分析可以去除属性与属性之间的冗余信息。如图 8和图 9所示,观察此图可以得知,图中给出了蠕变属性与属性之间的相关系数,相关系数的绝对值越大,表明两者之间相关程度越大,两属性之间存在冗余性。从分析结果中可以看出,C和B元素质量分数之间的相关系数为 0.935285,存在较强的相关性,因此可以认为二者之间可能存在冗余性。a_2T (二阶段时效处理温度) 和 B 元素之间的相关关系为 0.869216 ,相关性较强,因此二者之间也可能存在冗余性。



图 8 冗余属性分析

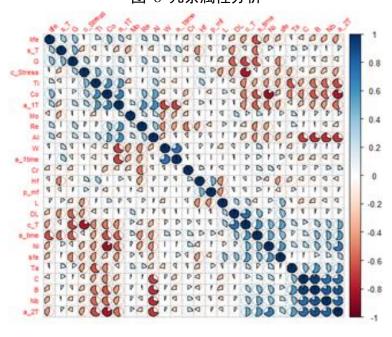


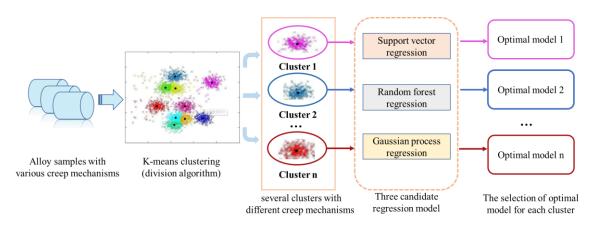
图 9 蠕变属性与蠕变属性之间的相关系数图

(2) 基于聚类的最优回归集成方法

(i) 方法的思想和过程

材料数据的材料数据通常呈现小样本、高维度和分布不均匀的特点,综合样本物理背景的复杂性,所以难以找到一种单一的模型对高维且具有一定物理复杂性背景的小样本进行建模。针对这个问题,我们提出了基于聚类的最优回归集成学习方法。

方法框架如图 4 所示,对于输入的学习样本,首先把它投射到特征空间并利用聚类的方法把样本划分为不同的簇,其中簇内样本的特性相似、簇间样本的特性不同;针对不同的簇,依据预测的精度从候选的支持向量回归、随机森林回归以及高斯过程回归等三种回归模型中选择最优的模型,最后通过异构集成的方法集成模型。



基于聚类的最优回归集成学习方法

(ii) 蠕变断裂寿命预测中的应用

我组通过收集并整合了文献和专利的图片数据、表格数据和文本中的数据,初步得到了 453 条蠕变数据,考虑到专利数据的完整性,最后用于蠕变寿命预测的数据全部选择专利,横向看,一共 402 条蠕变数据,纵向看,它包含了 25 个维度,其中有关于成分的 14 维: Ni, Re, Co, Al, Ti, W, Mo, Cr, Ta, C, B, Y, Nb, Hf, 热处理的 6 个维度:

固溶处理的时间和温度,两个阶段时效处理的时间和温度,外部条件的2个维度:温度和应力,还有目标属性:蠕变断裂寿命、蠕变断裂应变和到达指定应变的时间。



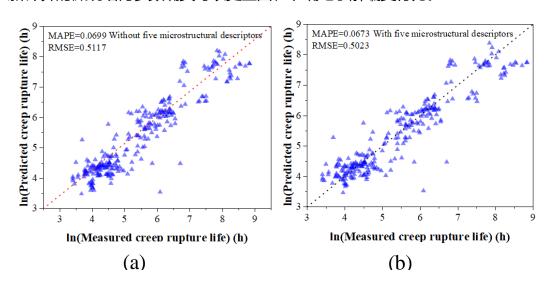
图 5 数据预处理的步骤

由于原始的样本存在空缺值、不一致和不同维度数值差异大等问题,不能构成学习样本,为此,我组对原始数据进行了数据预处理,如图 5 所示。首先时目标属性和条件属性的集成,目标属性选定为蠕变断裂寿命,条件属性则保留了所有的成分、热处理和外部条件;其次对数据进行了清洗,包括了一些成分空缺值的补零处理、缺失热处理样本的删除;最后对所有数据进行了归一化处理,最终形成了可学习样本 276条。

之后对上述的样本进行了数据质量检查和分析,通过求解各个属性的均值、方差、最小值、1/4 位数、中位数、3/4 位数、最大值、偏度和范围。通过分析,可以得出了两个重要的结论:第一,外部条件变化幅度大,包含了高温高应力、高温低应力、低温高应力、低温低应力这四种不同的情况,而在这四种外部条件下蠕变的机理存在一定的差异,第二,这276条样本中包含了不同体系(包含了1234代)的合金,而不同体系合金的蠕变机理也存在较大的差异。而在现有的小样本的情况下,不适合对所有体系的合金统一建模。

针对上述的问题,基于聚类的最优回归集成学习方法首先依据合金的宏观、微观多尺度的特性以及外部环境因素,采用聚类将其聚成不同的合金类,然后基于聚类划分的结果,针对不同性能的合金类以预测精度为学习目标采用集成学习方法为每类合金构建适合的模型。

为了验证添加这 5 个计算的微观结构因子是否能更准确、更有效地揭示蠕变行为,我们采用 BPNN 分别在没有这些描述符和有这些描述符的蠕变数据集上进行了预测实验。实验结果如图 6 所示。100 年平均日军和 RMSE 迭代数据集上的摘要没有这些微观结构描述符分别为 0.0699 和 0.5117,如图 6 所示(一个)。如图 6 所示(b),与这些微观结构描述符的数据集,摘要达到较高的预测精度与日军和 RMSE 0.0673 和 0.5023,这表明引入新计算的微观结构参数确实可以更全面、准确地了解蠕变行为。



而通过实验验证,如图 6 所示,聚类方法区分出了不同体系的合金和不同的外部条件。

图 6 聚类中心

其次,如图 7 所示,对比单一模型预测结果,基于聚类的最优回归集成学习方法能够更加准确的预测蠕变断裂寿命。

图 7 基于聚类的最优回归集成学习模型和单一预测模型的预测精度对比如图 8 所示,虽然总体的预测精度提高,但还存在部分样本的预测误差相比未聚类方法更高。

为了进一步证明基于分治的自适应学习方法的有效性,采用了 RF、SVR、GPR、BPNN、MLR 和我们的模型 DCSA 五种最先进的回归模型来预测蠕变破裂寿命。模型训练性能如图 10 所示,横轴为实测蠕变破裂寿命(实测值),纵轴为预测蠕变破裂寿命(预测值)。将上述六种模型预测的蠕变破裂寿命值作为实测值的函数绘制出来。图沿45_对角线排列越紧密,预测的蠕变破坏寿命与实测的蠕变破坏寿命越一致。由图 10 (f)可以直观地看出,DCSA 模型拟合效果很好,其中 6 个回归模型的 MAPE 和 RMSE 值如图 11 所示,其中蓝色的条形表示 MAPE,绿色的条形表示 RMSE。可以看出,与其他 5 个基线模型相比,DCSA 模型的 RMSE 和 MAPE 值最低,分别为 0.0359 和 0.0304,表明该模型具有较好的预测性能。

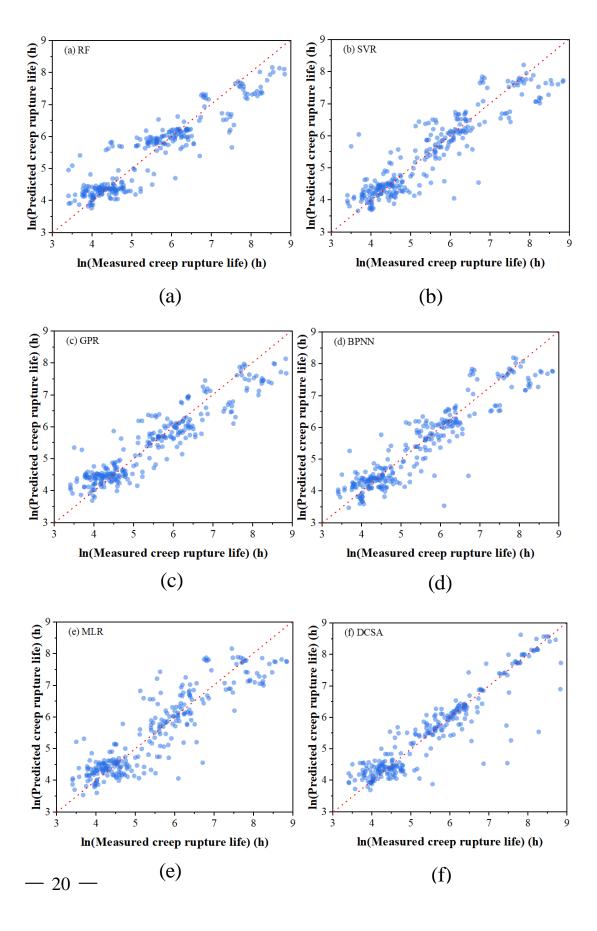


图 8 6 种机器学习模型对采集的蠕变数据集的预测性能。(a)随机森林(RF);(b)支持向量回归(SVR);(c)高斯过程回归(GPR);(d)反向传播神经网络;(e)多元线性回归(MLR);(f)我们提出的方法(DCSA)。

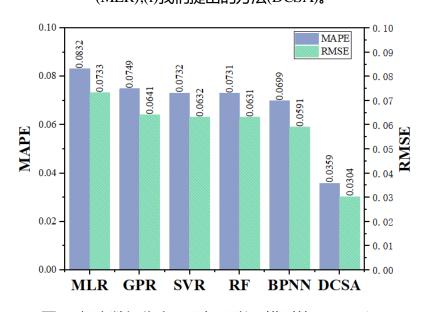


图 9. 蠕变数据集上不同机器学习模型的 MAPE 和 RMSE

(3) 基于聚类的蠕变性能优劣关联分析与规则抽取

针对收集到的高温合金蠕变性能数据,不单单只是希望能够通过回归分析方法准确高效地预测合金的蠕变断裂寿命,而且也需要重点聚焦于蠕变性能优劣的关联分析和规则抽取,利用提取的规则或知识指导高温合金设计和发现,最终以获得一种综合性能优异的高温合金.

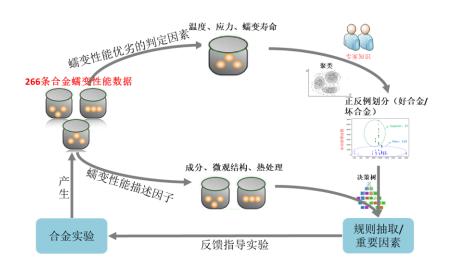


图 7

在采集的合金蠕变断裂寿命数据中,考虑到蠕变性能的优劣(superior/poor)可以由**蠕变测试温度、蠕变测试应力、蠕变断裂寿命**三个条件来决定,因而我们选取这三个因素,利用**聚类分析方法和领域专家知识**来对合金蠕变性能的优劣进行正反例划分。

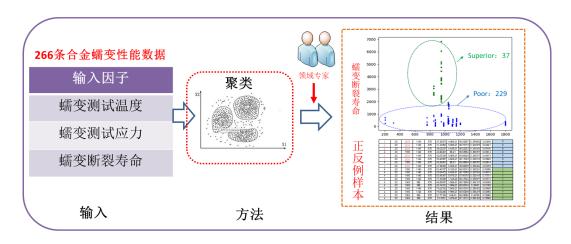


图 8

结论: 266 条蠕变性能数据,经过聚类分析以及专家经验判断之后,被划分为 superior 和 poor 两类,其中蠕变性能差 (poor)的合金数据有 229 条,蠕变性能好 (superior)的合金数据有 37 条。

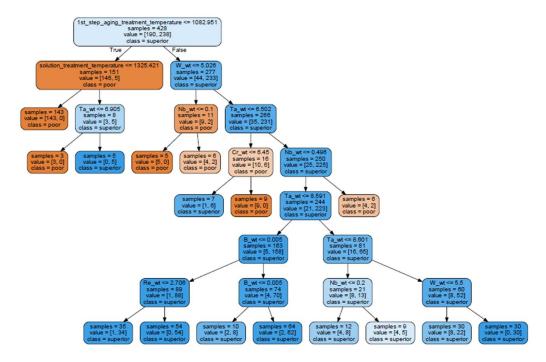


图 8 基于合金组分与热处理工艺的蠕变性能决策树

正例规则:

- 1.if 第一阶段时效处理温度 1082.951, 固溶处理温度>1325.421, Ta 元素的 质量分数>6.905, then **superior**;
- 2.If 第一阶段时效处理温度 1082.951, W 元素的质量分数> 5.026,Cr 元素的 质量分数 6.45.then **superior**;

反例规则:

- 1.if 第一阶段时效处理温度 1082.951, 固溶处理温度>1325.421, Ta 元素的质量分数<6.905, then **poor**
- 2.If 第一阶段时效处理温度 1082.951, W 元素的质量分数 5.026,then **poor**

• • •

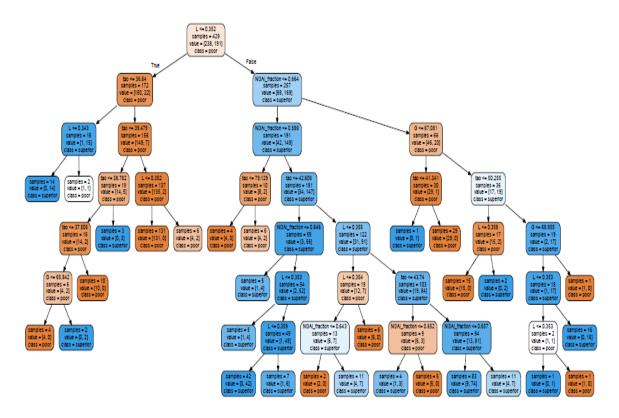


图 8 基于计算新属性的

正例规则:

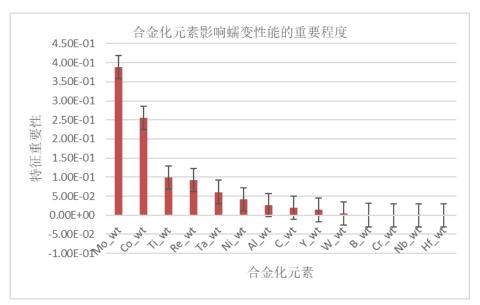
- 1.if 点阵常数 0.343<=L<=0.352, 层错能 τ<=36.64, then **superior**;
- 2.If 点阵常数>0.352, 0.646 <=Ni₃Al 相的体积分数<=0.664,层错能<=42.606,then superior

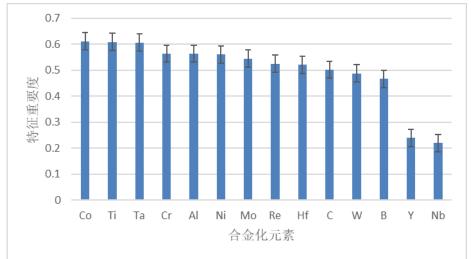
...

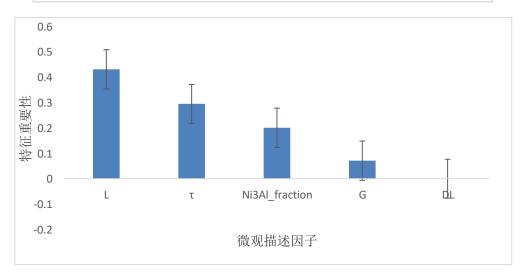
反例规则:

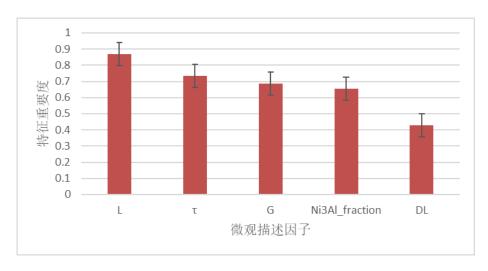
1.if 点阵常数 L<=0.352,36.64<层错能 τ<=37.506,剪切模量<=65.842, then poor2.If 点阵常数 L<=0.352,层错能 τ>39.479,then poor

. . .









2.项目调整情况

如项目出现超前/迟滞等情况,请详细说明原因、措施及履行相关审批管理制度的情况。

- 二、取得的重要进展及成果
- 1.项目中期重要进展及成果

简要介绍项目研究工作的重要进展、阶段性成果 (一般不超过3项)及前景。

2.预期经济社会效益

重点阐明对学科/行业产生的重要影响,对社会民生、生态环境、国家安全等的作用,以及研究成果的合作交流、转移转化和示范推广情况,人才、专利、技术标准战略在项目中的实施情

况等。

- 三、项目人员及经费投入使用情况
- 1.人员及经费投入情况

对照项目任务书阐述项目及课题资金(包括中央财政专项资金、其他来源资金等)到位情况、项目资金单独核算情况、预算调剂情况、支出情况和经费使用监督管理情况、人员投入情况等。

2.项目经费拨付情况

项目牵头单位向课题承担单位、课题承担单位向课题参与单位拨付中央财政专项资金情况。

3.人员及经费实际调整情况

如出现项目人员的调整,以及经费未及时到位、停拨、迟拨等特殊情况,请详细说明原因、措施、履行相关审批管理制度以及整改等情况。

四、项目配套支撑条件情况

阐述各主要研究任务的配套支撑条件落实及调整变化情况。 如有调整变化,请说明调整变化对完成项目目标的影响和作用。

五、项目组织实施管理工作

1.项目组织管理情况

阐述项目按照一体化组织实施的要求, 内部管理机构和管理制度建立、运行情况和效果, 以及项目牵头单位组织课题间交流、检查评估等方面的管理情况。

2.项目间协作情况

阐述项目参与重点专项的相关管理活动,项目间资源与数据 共享、协作研发以及成果转化应用情况等。

3.组织实施风险及应对情况

阐述项目在组织实施过程中,面对外部政策、组织管理、研 发变化和知识产权等方面的风险以及应对措施。

- 六、项目组织实施中的重大问题及建议
- 七、任务书中有特殊约定或其他需要说明的事项
- 八、专业机构要求提交的其他材料

附表 1

国家重点研发计划项目中期执行情况信息表

一、项目基本情况

| 项目 | 目名称 | | | | | | | | | | | | |
|----------|------------|------------|-----------------------------|------|------------|----------------|---------|------------|----|------|--|--|--|
| 项目 | 目编号 | | | | | | | | | | | | |
| 所属 | 属专项 | | | | | | | | | | | | |
| 指雨 | 南方向 | | | | | | | | | | | | |
| 运 | 密级 | | □公开 □秘密[| □机密 | 单位总数 | | 课是 | | | | | | |
| ~T: F | ⊐ NA.#d | | □基础前沿 □重大共性关键技术 □应用示范研究 □其他 | | | | | | | | | | |
| - 坝目 | 目类型 | | 青年项目 | | | | | | | | | | |
| 经界 | 费预算 | | 预算 万元,其中 万元,其他渠道 | | | 万元,地方则 | 才政资金 | · 万元 | ,单 | 位自筹资 | | | |
| -# D D | □ #n ++ ► | 起 | 始时间 | 年 | F 月 | 结束时间 | | | 年 | 月 | | | |
| | 项目周期节点 | | 施周期 | 共 | 个月 | 预计中期时 | 间点 | | 年 | 月 | | | |
| | 单位名称 | | | | | 单位性质 | | | | | | | |
| -石口 | 单位所在 | 地 | | | | 组织机构作 | 弋码 | | | | | | |
| 项目 牵头 | 通信地址 | Ŀ | | | | 邮政编码 | 马 | | | | | | |
| 承担 | 银行账号 | <u>1</u> , | | | | 法定代表人 | 姓名 | | | | | | |
| 单位 | 单位开户名 | | | | | 汇入地点 | 넋 | | | | | | |
| | 开户银行 称) | (全 | | | | 银行机构作 | 弋码 | | | | | | |
| 推荐 单位 | 单位名称 | 单位名称 | | | 推荐单位 性质 | □部门 □ 技术创新战 | | □行业 □其他 | | □产业 | | | |
| 项目 | 姓名 | | | 性 别 | □男□女 | 出生 | 日期 | | | | | | |
| 负责 | 证件类型 | 1 | i | 证件号码 | | | | • | | | | | |
| 人 | 所在单位 | Ĭ. | | | | | | | | | | | |

| | 最高 | 学位 | | | □博 | ± [|]硕士 | . 🗆 | 学士 □其 | 他 | | |
|-----------------------------|----|------|-----------------|----------------|--------|-----|------|---------|-------------|-----|---------|------------------------|
| | 职 | 称 | | 正高级 口語 | 削高级 □中 | □级□ | □初级 | ά 🗆 | 其他 | 职多 | | |
| | 电子 | 邮箱 | | | | | 移 | 动 | 电话 | | | |
| 项目 | 姓 | 名 | | | 电子 | 邮箱 | | | | | | |
| 联系 | 固定 | 电话 | | | 移动 | 电话 | | | | | | |
| 人 | 证件 | 类型 | | 证件号码 | | | | | | | | |
| 项目 | 姓 | 名 | | | 电子邮箱 | | | | | | | |
| 财务 负责 | 固定 | 电话 | | 移动电话 | | | | | | | | |
| 人 | 证件 | 类型 | | | 证件 | 任号码 | | | | | | |
| 课题 | 序号 | 课题 | 包称 | 承 注 单 | | 负 | 毎 人 | | 总经费 (万元) | | 灰 | 其中中央 f政专项资金 (万元) |
| 分解 | | | | | | | | | | | | |
| 其他 | 序号 | | | 单位名称 | | | | È | 单位性质 | | 组 | l织机构代码 |
| 参与单位 | | | | | | | | | | | | |
| 项目参 | | 人。其中 | l ı. | 高级 | 贺职称人, | 中级 | 职称 | | 人,初级职和 | 弥丿 | ,其 | 他人; |
| 加人数 | | 八。兴 | Γ; | 博士 | :学位人, | 硕士 | 学位_ | _) | (, 学士学位 | 立/ | 、,其 | 他人。 |
| 项目执行 情况 | | | | 达到预期目 达到预期目 | | | , 超过 | 过预 | 項目标 項 | i目状 | 况 | □去年延续 □今年新立 |
| 与专项内 企业合作 | | 目/应月 | 用单位/ | □信息交流 | □技术營 | 子询 | □研发 | | ∵作 □成果 | 是转化 | | 实现产业化 |
| 项目 简介 (限 1500 字以内) | | | | | | | | | | | | |

填表说明: 1. 组织机构代码指企事业单位国家标准代码,单位若已三证合一请填写单位统一社会信用代码, 无组织机构代码的单位填写"000000000";

2. 单位公章名称必须与单位名称一致;

3. 单位开户名称应与单位名称一致,如有开户名称不一致等特殊情况,必须提供证明文件。

— 31 —

二、项目中期经费及人员投入情况(经费单位:万元)

| 总资金 | ž | | | 中 | 央财政专项资 | 金 | | | 其他来源资金 | | | |
|-----|-------|------|------|------|--------|--------------------|----------|---------------------------|--------|-------|----------|--|
| 预算数 | 累计到位数 | 预算数 | | 累计到 | 到位数 | 拨付课题 承担单位 金额 | 累计资金 支出数 | 是否按计 划拨付课 题承担单 位 | 预算数 | 累计到位数 | 累计资金 支出数 | |
| | | | | | | | | | | | | |
| 总人数 | 其中女性 | 高级职称 | 中级职称 | 初职职称 | 其他人员 | 博士 | 硕士 | 学士 | 其他学历 | 总人 | 年 | |
| | | | | | | | | | | | | |

三、项目中期目标及考核指标完成情况

| | | | 对应的 课题 | | 考核 | 亥指标 | | 考核 方式 | |
|------|----------|--|-----------|----------|-----------------|---------|-----------|-----------------------|------------|
| 项目目标 | 成果 名称 | 成果 类型 | | 指标 名称 | 立项时已有 指标值/状态 | 中期指标值/ | 完成时指标值/状态 | (方 法)及 评价 手段 | 当前指标状 态 |
| | | □新理论 □新原理 □新产品 □ 新技术 □新方法 □关键部件 □数 据库 □软件 □应用解决方案 □实 | | 指标 1.1 | | | | | |
| | 1: | 验装置/系统 □临床指南/规范 □ 工程工艺 □标准 □论文 □发明 专利 □其他 | | ••••• | | | | | |

| ı | | | | | | 1 | |
|------|----|--------|---|--------|--------------------|-----|--------|
| | | 指标 2.1 | 无 | 初步建立软件 | <mark>实现数据关</mark> | 现 场 | 采集和存储 |
| | | | | 框架,并获得 | <mark>联分析通用</mark> | 评 测 | 了一份关于 |
| | | | | 相关材料数据 | 软件,提取 | 或 第 | "文献一数 |
| | | | | | 数据规律, | 三 方 | 据一方法" |
| | | | | | 建立构效关 | 检测, | 的镍基单晶 |
| | | | | | 系,登记软 | 软 件 | 高温合金材 |
| | | | | | 件著作权 1 | 登记 | 料成分-结 |
| | | | | | 项,发表论 | 受 理 | 构-工艺-性 |
| | | | | | 文 2 篇 | 通知, | 能数据;设 |
| | | | | | | 论 文 | 计与初步实 |
| | | | | | | 发 表 | 现了基于主 |
| | | | | | | 或 录 | 动学习的多 |
| | | | | | | 用通 | 层级交互式 |
| | | | | | | 知 | 特征选择方 |
| | | | | | | | 法和非自动 |
| | | | | | | | /半自动/全 |
| | | | | | | | 自动的机器 |
| | | | | | | | 学习集成学 |
| | | | | | | | 习方法,并 |
| | | | | | | | 在蠕变断裂 |
| | | | | | | | 寿命的预测 |
| | | | | | | | 中得到初步 |
| | | | | | | | 应用;结合 |
| 2: | 同上 | | | | | | 和利用聚类 |
| | | | | | | | 分析和决策 |
| | | | | | | | 树算法等, |
| | | | | | | | 构建了能够 |
| | | | | | | | 精确预测合 |
| | | | | | | | 金蠕变性能 |
| | | | | | | | 优劣的决策 |
| 24 | | | | | | | 模型,并基 |
| 34 — | | | | | | | 于此对合金 |
| | | | | | | | 的蠕变构效 |
| | | | | | | | 关系进行了 |
| | | | | | | | 正反例分析 |
| | | | | | | | 简单的规则 |
| | | | | | | | 抽取;开发 |
| | | | | | | | 了宣泪人会 |

| | | | ••••• | | | | | |
|----------|-------|------|-------|---|------|--|-----|---------------------|
| | ••• | 同上 | 指标 | | | | | |
| | | | ••••• | | | | | |
| 科技报告考核指标 | 序号 | 报告类型 | 数量 | 1 | 是交时间 | | 別及时 | 是否按计划 提交科技报 告 |
| J MAHAA. | | | | | | | | |
| 其他目标与 | 考核指标完 | 尼成情况 | | | | | | |

四、项目中期取得经济社会效益情况

| 1. 标准 | 获得国际标准数 | | 获得 | 国家标准数 | | | |
|-----------------|--|------------------------|---------|-------------|------------|------|--|
| 情况 | 获得行业、地方标准数 | | 获得 | 其他标准数 | | | |
| | 申请发明专利项数 | | 获得 | 授权发明专利 | 项数 | | |
| 2. 专利 | 其中国际 | | 其中 | 国际 | | | |
| 情况 | 申请其他各类专利项数 | | 获得 | 授权其他各类 | 专利项数 | | |
| | 其中国际 | | 其中国际 | | | | |
| 3. 专著人 | 毕业研究生数 | | 其中 | 博士生 | | | |
| 才等情况 | 取得软件著作权数 | | 出版 | 专著数 | | | |
| 4. 新理 | 取得的新理论、新原理数 | | 取得 数 | 的新技术、新 | 工艺、新力 | 法 | |
| 论、新技 | 取得的新产品、新装置数 | | 示范 | 、推广面积数 | (亩) | | |
| 术、新产 | 获得新药(医疗器械)证书数、 | | 歩須 | | | | |
| 品等情况 | 临床批件数 | | 37.17 | 利用/个7月用、 及 | 14日多人 | | |
| | 新建生产线数 | | 新建 | 示范工程数 | | | |
| 5. 培训 情况 | 培训技术人员数 | | 培训农民数 | | | | |
| 6. 成果转 化情况 | 成果转让数(项) | | | | | | |
| 论文专著 | 论文/专著名称 | 发表 | 期刊/ | 出版单位 | 完成人 | 发表时间 | |
| 发表情况 | | | | | | | |
| (请列出 不超过 5 | | | | | | | |
| | | | | | | | |
| 论文) | ••• | | | | | | |
| 专利申请 授权情况 | 申请/授权的专利名称 | 申请号 批准 ^县 | | 申请/ 批准国别 | 完成人 | 专利类型 | |
| (请列出 | | | | | | | |
| 不超过 5 | | | | | | | |
| 项代表性 专利) | | | | | | | |
| マイリノ | ************************************** | | t-va- | NA TH | 1 1 | > | |
| | 获得技术标准名称 | | 标准 | 类型 | * | 示准号 | |
| 技术标准 | | | | | | | |
| 获批情况 | | | | | | | |
| ++ /.1. ↓+->.>> | ••• | | | | | | |
| 其他情况 | | | | | | | |
| (不超过 5 项) | ••• | | | | | | |
| U */X/ | | | | | | | |

附表 2

国家重点研发计划课题中期执行情况信息表

一、课题基本情况

| 课是 | | | | | | | | | |
|----------|--------------------------|--------------|------------------|------|----------------|----|---|--|--|
| 课是 | 返编号 | | | | | | | | |
| 所属 | 属项目 | | | | | | | | |
| 所属 | 属专项 | | | | | | | | |
| 垃 | 否级 | □公开 □秘報 | □公开 □秘密 □机密 单位总数 | | | | | | |
| 课是 | 0类型 | □基础前沿 □重大 | ;共性关键技术 [| コ应用え | 示范研究 □其他 | | | | |
| 课题清 | 课题活动类型 □基础前沿 □应用研究 □试验发展 | | | | | | | | |
| | 题研究 属学科 | 一级学科 二级学科 | | | | | | | |
| | 是应用的主 经济行业 | | | | | | | | |
| | 的社会 | 一级目标 二级目标 | | | | | | | |
| 经费 | 费预算 | 总需求 万元,其中 | 中央财政专项资 | 金需求 | 万元 | | | | |
| \H HZ [| a #n-++- +- | 起始时间 | 年 月 | | 吉東时间 | 年 | 月 | | |
| 课题周期节点 | | 实施周期 | 共 个月 | | 预计中期时间点 | 年) | 月 | | |
| | 单位名称 | ĸ | | · | 单位性质 | | | | |
| 课题 单位所在地 | | 地 | | | 组织机构代码 | | | | |
| 承担 单位 | 通信地址 | | | | 邮政编码 | | | | |
| | 银行账号 | Ţ | | | 法定代表人姓名 | | | | |

| | 单位是 | | | | | | | | | | | | |
|--------------------|-----------------|------|------------------------|-----------------|------|----------------|----------------|-----|--------|------------|----------|--------------|-------|
| | 名 开户银 称 | 行(全 | 包括银行 | 机构代码的 | 的显示 | | | | | | | | |
| | 姓 | 名 | | | 性 | 别 | □男□₃ | 女 | 出生 | 上日期 | | | |
| | 证件 | 类型 | | | 证件 | 号码 | | | | | <u>I</u> | | |
| 课题 | 所在! | 単位 | | | | | | | | | | | |
| | 负责 人 最高学位 | | | □博士 □硕士 □学士 □其他 | | | | | | | | | |
| | 职称 | | 口正 | 高级 □晶 | 间高级 | □中纟 | 及 □初级 | □其ℓ | 他 | 职务 | | | |
| | 电子 | 邮箱 | | | | | 移 | 动电话 | | | | | |
|)田 田南 | 姓 | 名 | | | | 电子邮 | 3箱 | | | | | | |
| 课题 联系 人 | 系 固定电话 | | | | 移动电话 | | 记话 | | | | | | |
| 八 | 证件 | 类型 | | 证件号码 | | } 码 | | | | | | | |
| 课题 | 姓 | 名 | 电子邮箱 | | 3箱 | | | | | | | | |
| 财务 负责 | 固定 | 电话 | 移动电话 | | 记话 | | | | | | | | |
| 人 | 证件 | 类型 | | | | 证件号 | } 码 | | | | | | |
| 其他 参与 | 序号 | | | 单位名称 | | | | 单位性 | 生质 | | 组织机构代码 | | 码 |
| 単位 | | | | | | | | | | | | | |
| 课题参 | | 人。其 | ·H | 高组 | 及职称_ | 人, | 中级职称_ | _人, | 初级职 | 称_人, | 其他 | 人; | |
| 加人数 | _ | 八。六 | 博士学位人,硕士学位人,学士学位人,其他人。 | | | | | | | 人。 | | | |
| 项目执行 进展情况 | , _ | | | 预期目标 预期目标 | _ | 度超前 度停顿 | ī,超过预 [| 期目标 | · 巧 | 月状况 | |]去年延 今年新 | |
| 与专项内 企业合作 | | 目/应/ | 用单位/ □ |]信息交流 | □技 | 大咨询 | □ □研发 | 合作 | □成身 | 果转化 | □实现 | 见产业化 | Ł |
| 课题 简介 (限 500 | | | | | | | | | | | | | |

| 字以内) | | |
|------|--|--|
| | | |

二、 课题中期经费及人员投入情况 (经费单位: 万元)

| 总资金 中央财政专项资金 | | | | | 其他来源资金 | | | | | | |
|-----------------|-------|----------|-----------|----------|----------|------------------------|---------|-------------------|----------|-------|-----------|
| 预算数 | 累计到位数 | 预复 | 拿数 | 累计到位数 | | 拨付课 题参与 单位金 额 | 累计资金支出数 | 是否按 计划课题 参位 | 预算数 | 累计到位数 | 累计资 金支出 数 |
| | | | | | | | | | | | |
| 总人数 | 其中女性 | 高级职 称 | 中级职 称 | 初职职 称 | 其他人 员 | 博士 | 硕士 | 学士 | 其他学 历 | 总丿 | 年 |
| | | | | | | | | | | | |

三、课题中期目标及考核指标完成情况

| | | | 考核指标 | | | | 考核方 式(方 | 本年 |
|--------------------|--------------|---|--------|-----------------|--------------|-----------|------------|---|
| 课题目标 | 成果 名称 | 成果 类型 | 指标名称 | 立项时已有 指标值/状态 | 中期指标值/ 状态 | 完成时指标值/状态 | ν±\ π | 度指 标状 态 |
| | 1: | □新理论 □新原理 □新产品 □新技术 □新方法 □关键部件 □数据库 □软件 □应用解决方案 □实验装置/系统 □临床指南/规范 □工程工艺 | 指标 1.1 | | | | | |
| | | □标准 □论文 □发明专利 □其他 | ••••• | | | | | |
| | 2: | 同上 | 指标 2.1 | | | | | |
| | ۷٠ | | ••••• | | | | | |
| | ••• | 同上 | 指标 | | | | | |
| | | | ••••• | | | | | |
| 科技报告考 核指标 | 序号 | 报告类型 | 数量 | 4 | 是交时间 | 公开 | 类别及时 限 | 是 按 划 交 技 程 程 程 程 4 2 4 4 5 4 5 4 5 4 5 5 5 5 6 7 6 7 7 8 7 8 7 8 7 8 7 8 7 8 7 8 7 8 |
| 其他目标与考 | | · 字 | | | | | | |
| 八 他日你与有 | 7次1日外 | 元以利利 | | | | | | |

四、课题中期取得经济社会效益情况

| 1. 标准 | 获得国际标准数 | | 获得 | 国家标准数 | | | | |
|-------------------|-------------------------|------------------------|-------------|-------------|----------|------|--|--|
| 情况 | 获得行业、地方标准数 | | 获得 | 其他标准数 | | | | |
| | 申请发明专利项数 | | 获得 | 授权发明专利 | 项数 | | | |
| 2. 专利 | 其中国际 | | 其中国际 | | | | | |
| 情况 | 申请其他各类专利项数 | | 获得 | 授权其他各类 | 专利项数 | | | |
| | 其中国际 | | 其中国际 | | | | | |
| 3. 专著人 | 毕业研究生数 | | 其中 | 博士生 | | | | |
| 才等情况 | 取得软件著作权数 | | 出版 | 专著数 | | | | |
| 4. 新理 | 取得的新理论、新原理数 | | 取得数 | 的新技术、新 | 工艺、新力 | 法 | | |
| 论、新技 | 取得的新产品、新装置数 | | 示范 | 、推广面积数 | (亩) | | | |
| 术、新产 品等情况 | 获得新药(医疗器械)证书数、 临床批件数 | | 获得临床指南、规范数 | | | | | |
| ,,,,,,, | 新建生产线数 | | 新建示范工程数 | | | | | |
| 5. 培训 情况 | 培训技术人员数 | | 培训农民数 | | | | | |
| 6. 成果转 化情况 | 成果转让数(项) | 成果转让收入(万) | | | | | | |
| 论文专著 | 论文/专著名称 | 发表 | 期刊/ | 出版单位 | 完成人 | 发表时间 | | |
| 发表情况 | | | | | | | | |
| (请列出 不超过 5 | | | | | | | | |
| ー 不超过 5 - 篇代表性 | | | | | | | | |
| 论文) | ••• | | | | | | | |
| 专利申请 授权情况 | 申请/授权的专利名称 | 申请号 批准 ⁵ | | 申请/ 批准国别 | 完成人 | 专利类型 | | |
| (请列出 | | | | | | | | |
| 不超过 5 | | | | | | | | |
| 项代表性 | | | | | | | | |
| 专利) | | | | | | | | |
| | 获得技术标准名称 | | 标准 | 类型 | <u>†</u> | 示准号 | | |
| 技术标准 | | | | | | | | |
| 获批情况 | | | | | | | | |
| 22. 22. 23. co | ••• | | | | | | | |
| 其他情况 | | | | | | | | |
| (不超过 5 项) | ••• | | | | | | | |
| り火ノ | •••• | | | | | | | |