**机器学习在单晶高温合金材料中的应用**

# 1 研究背景

不断提高高温合金性能一直是特定工业发展的要求，但由于在高温合金的制备过程中，影响其性能的因素很多，难以利用普通的建模方法描述各个工艺参数与其性能之间的关系，而利用机器学习方法在高温合金制备工艺和细晶铸造工艺等过程中，对主要影响合金组织、性能的工艺参数进行分析，建立相应的预测模型，通过在实验之前对所要研究的对象性能进行预测，再根据预测结果调整高维问合金制备工艺参数，从而可以降低研制成本，缩短研发时间[1][16]。

## 1.1 国内对高温合金材料研究

在国内关于机器学习在高温合金中的应用4篇相关方面的研究，同时我们找到了很多我国对高温合金的研究，这里我们列出中国科学院金属研究所的相关研究。

表1高温合金和单晶高温合金的国内研究

|  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| **研究机构** | **作者** | **机器学习方法** | **合金材料** | **取得的结果** | **刊物** | **发表时间** |
| 北京航空材料研究所 | 桂忠楼[48] | ANN | 单晶高温合金 | 利用网络对单晶高温合金性能进行预测。 |  | 1992 |
| 北京航空材料研究院 | 田高峰[41] | 最小二乘法 | 高温合金r’ | 合金成分对粉末高温合金＇相溶解温度的影响行为。 |  | 2004 |
| 西北工业大学 | 郭鹏[16] | BP神经网络 | 高温合金，单晶高温合金 | 建立了预测合金组织和性能模型，建立了工艺参数到组织，再到性能的预报模型。 |  | 2004 |
| 武汉大学 | 于洋洋[18] | ANN，BP | 镍基高温合金 | 采用人工神经网络方法可以为镍基变形合金蠕变断裂寿命的预测。 |  | 2005 |

国内关于机器学习在高温合金中的应用的研究并不多，主要集中在2004、2005年，主要是利用机器学习中的ANN，BP神经网络以及最小二乘法对高温合金材料的性能、寿命等一些相关性质进行预测。缺点：所涉及到的机器学习方法比较单一，预测高温合金的特性的范围比较狭窄。未来我们可以尝试用更多的机器学习方法，用到高温合金材料的其他相关领域。

表2国内高温合金的相关研究

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
| **研究机构** | **作者** | **合金** | **研究** |  |
| 中国科学院金属研究所 | 林惠文[6] | 镍基单晶高温合金 | Pt对合金持久变形组织和位错形态的影响 | 2015 |
| 中国科学院金属研究所 | 韩国明[4] | Ni-Fe基高温合金 | P的添加对Ni-Fe基高温合金组织性能的影响 | 2015 |
| 中国科学院金属研究所 | 宁礼奎[5] | 新型含Re镍基单晶高温合金 | 不同含量的Ru对一种新型含Re镍基单晶高温合金的铸态组织影响 | 2015 |
| 中国科学院金属研究所 | 周鹏杰[7] | M951镍基高温合金 | 对M951镍基高温合金的高温高周疲劳性能测试 | 2013 |
| 中国科学院金属研究所 | 谢君[3] | K416B镍基高温合金 | 研究了K416B镍基高温合金700 ℃的高周疲劳行为 | 2016 |
| 中国科学院金属研究所 | 杨金侠[2] | 单晶高温合金 | 研究了P在DD6单晶中的分布状态及其对DD6合金力学性能的影响 | 2016 |

## 1.2国内机器学习在合金材料中的应用

国内将机器学习方法应用在合金材料中的机构主要有中国科学院金属研究所，以及其他一些大学

表3 国内合金材料与机器学习现状

|  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| **学校名称** | **作者** | **机器学习方法** | **合金材料** | **取得的结果** | **发表时间** |
| 中国科学院金属研究所 | 侯介山[11] | ANN | NiAl及添加P,Mo, Fe,Y,Ce,Nb,Cr和Hf元素的NiAl系合金 | 利用模型预測可以得出优化后的NiAl及NiAl系合金化学成分、最大延伸率以及最佳实验条件范围。 | 2013 |
| 中国科学院金属研究所 | 李晓峰[13] | ANN | 碳钢、低合金钢 | 预测的腐蚀速率数据,可以为腐蚀专业和非腐蚀专业的工程技术人员提供腐蚀分析的依据. | 2008 |
| 中国科学院金属研究所 | 王海涛[9] | BP神经网络 | 铝合金 | 利用单一因素敏感性分析,计算了合金元素和环境因素对于铝合金大气腐蚀速率的影响. | 2006 |
| 中国科学院金属研究所 | 王海涛[14] | ANN | 碳钢、低合金钢 | 通过单一因素敏感性分析方法,研究了合金元素和环境因素对于大气腐蚀速率的影响 | 2006 |
| 中国科学院金属研究所 | 李章刚[12] | 知识推理、神经网络、遗传算法、数值模拟 | 铜合金 | 实现铸轧工艺中水平连铸,三辊行星轧制和游动芯头拉拔三个主要工序的智能化工艺设计 | 2005 |
| 中国科学院金属研究所 | 薛小怀[8] | ANN | 杂质元素S,P,O,N和合金元素C, Mn, Ti | 建立了熔敷金属力学性能的预测模型。 | 2001 |
| 中国科学院金属研究所 | 薛小怀[15] | ANN | C,Mn,Si,Mo,Ti、B、Ni、Cu、S、P、O、N等合金化元素 | 合金元素对熔敷金属低温韧性的影响。 | 2001 |
| 昆明理工大学 | 刘英莉[51] | BP神经网络 | ZnCu2Al10合金 | 采用Gleeble- 3800热模拟实验机研究ZnCu2Al10合金在变形温度为150~330℃,应变速率为0.01~ 10s-1下的高温流变行为 | 2016 |
| 内蒙古工业大学 | 安迪[53] | ANN | Mg-Zn-Zr-Y-Nd合金 | 研究了变形工艺参数对该合金流变应力的影响规律,建立了流变应力的反向传播(BP)神经网络预测(ANN)模型 | 2016 |
| 浙江工业大学 | 熊缨[54] | 神经网络 | 镁合金 | 提出一种以相对误差平方和作为误差性能函数的反向传播神经网络算法(SSRE-BP),针对3种不同镁合金AZ31B、ZK60和AZ61A在单轴拉压、纯扭、45°比例和90°圆形非比例等4种不同加载路径下的疲劳寿命进行预测 | 2016 |
| 西北工业大学 | 陈海生[52] | BP | Ti-6Al-3Nb-2Zr-1Mo合金 | 通过对Ti-6Al-3Nb-2Zr-1Mo合金820--970℃ ,0.0011 s-1条件下的热模拟压缩试验,建立该合金BP-ANN本构预测模型和传统的回归模型 | 2016 |
| 中国海洋大学 | 张莹[40] | 优化SVM | 钢铁合金 | 建立多元素变量的定量分析模型， 预测钢铁合金样品中O和Ｎi元素的含量。 | 2016 |
| 解放军理工大学 | 谭业发[50] | LS-SVM | TiCp/镍基合金 | 预测干摩擦条件下TiCP/镍基合金复合涂层的摩擦磨损行为。 | 2013 |
| 中南大学 | Y.C. Lin [30] | ANN | 低温合金钢铁 | 预测低温合金钢铁的高温压缩变形行为 | 2010 |
| 西安航空发动机有限公司 | 刘雄飞[17] | ANN | 高温合金GH4037 | 建立金属中化学成分与力学性能间的隐性函数,可预测得到良好的合金力学性能。 | 2010 |
| 西北工业大学 | 尹欣[42] | BP,遗传算法 | 雾化合金 | 基于集对势容差关系的变精度粗糙集和混合核函数为建模工具的最小二乘向量机（LS\_SVM）的预测模型。 | 2008 |
| 沈阳工业大学 | 李润霞[10] | ANN | A345 | 固溶温度、固溶时间、时效温度和时效时间对A354合金热处理性能的影响。 | 2004 |
| 沈阳工业大学 | 张国英[44] | ANN | 合金成分(Nb,Ti,co) | 建立高CO-Ni二次硬化钢的力学性能与合金成分及热处理温度对应关系的模型。 | 2000 |
| 东北大学 | 张国英 [46] | ANN | 高Co-Ni 二次硬化钢 | 建立高Co -Ni 二次硬化钢的力学性能与合金成分及热处理温度对应关系的模型。 | 1999 |
| 中国科学院上海冶金研究所 | 蔡煜东[47] | ANN | 过渡金属元素 | 对高氧化态(II—IV) 三核金属簇合物的构型分布进行了分析, 得到了较好的分类 | 1994 |

## 1.3国外机器学习在高温合金材料中的应用

国外应用机器学习对高温合金材料的研究主要有美国的西北大学，德国的弗里茨哈伯研究所德普朗克协会以及美国麻省理工学院。

德国的弗里茨哈伯研究所德普朗克协会，他们研究组使用各种最先进的机器学习方面的工具,如密度泛函理论计算,蒙特卡罗模拟,分子动力学模拟,数据库和高通量进行分析 (i) 研究热力学方面处理结构热电材料的关系, （2）研究材料的物理学组织性能关系,(3) 通过各种机制改变这些材料的结构提高热电性能。

表4. 国外合金材料与机器学习的现状

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
| **单位** | **作者** | **机器学习** | **合金** | **结果** |
| 美国西北大学  Northwest university | Gregory A[27] | 决策树方法 | 磁铁过渡金属合金 | 构建磁铁过渡金属合金预测模型 |
| 美国克莱姆森大学Cramson university | Vasisht Venkatesh[22] | BP神经网络 | 高温Ni- base合金铬镍铁合金690 | 对高温Ni-base合金铬镍铁合金690的蠕变疲劳行为的寿命进行预测 |
| 韩国机械与材料学院Institute of mechanical and material | Y.S. Yoo[26] | 贝叶斯神经网络方法 | 单晶镍基高温合金 | 对单晶镍基高温合金的蠕变断裂寿命预测 |
| 英国女王大学  Queens’ university | S.Mailnov[45] | ANN | 钦合金 | 造型工艺参数和属性之间的相关性 |
| 伊朗,谢里夫理工大学Sharif University of Technology | M. Talebi Anaraki | ANN | AZ61镁合金 | 高温流变行为预测 |
| 英国，西英格兰大学University of the West of England | R.P. Cherian | 神经网络 | 粉末冶金材料 | 推荐合适的金属粉末组成和流程设置 |

## 1.4数据来源

关于数据我们发现，在合金实验中，数据主要有实验数据和计算数据两种，大部分是根据现有实验数据，然后根据对实验数据模拟分析，得到预测数据，最后与具体的实验结果进行对比，这是传统的机器学习方法数据处理方式。计算数据通常是根据所要求的材料成分及性能，应用机器学习或其他方法，模拟出合金或相应实验后的数据，最后在和真正的实验数据进行比较。有一篇文章提到了关于计算数据的来源及处理：

刘雄飞等人采用改进型BP神经网络的应用过程，通过分析高温合金在热处理过程中，材料金属成分与力学性能之间的数学关系，最后将计算数据与标准力学性能实验数据进行比较分析，实验证明预测结果可以作为理化实验的重要参考数据。

## 参考文献

1. 桂忠楼,陈立江,人工神经网络在单晶合金设计中的应用[J],材料工程, 1992(5)2.
2. 高峰,陈阳,周磊,武丹,邹金文. 粉末髙温合金r’相溶解温度的成分敏感性研究[J]. 第十三届中国高温合金年会大摘要文集. 190.

[1]孙晓峰,金涛,周一胄,胡壮麒. 镍基单晶高温合金研究进展[J].中国材料进展.2012(31)12. 1-9.

[2]杨金侠,李金国,金涛,孙晓峰,胡壮麒. P在DD6单晶高温合金中的存在形态和作用[J].稀有金属材料与工程.2016(45)4. 1254-1256.

[3]谢君,于金江,孙晓峰,金涛. K416B镍基铸造高温合金的700℃高周疲劳行为[J]. 金属学报2016(52)3. 257-263.

[4]韩国明,关帅,崔传勇,孙晓峰,胡壮麒. P对一种Ni-Fe基髙温合金组织性能的影响[J]. 第十三届中国高温合金年后大摘要文集. 89.

[5]宁礼奎,唐颂,刘恩泽,佟健,郑志,金涛,孙晓峰. Ru对单晶髙温合金铸态组织的影响. 第十三届中国高温合金年后大摘要文集. 115.

[6] 林惠文,刘纪德,周亦胄,金涛,孙晓峰. Pt对镍基单晶高温合金持久性能的影响[J]. 金属学报. 2015.(51)1.77-84.

[7] 周鹏杰,于金江,孙晓峰,管恒荣,何向明,胡壮麒. M951镍基高温合金的高温高周疲劳性能[J]. 机械工程材料. 2013.(37)7. 77-80,102.

[8] 薛小怀,国旭明,钱百年,于少飞,杨柯,訾炳涛. 熔敷金属力学性能人工神经网络模型的研究[J]. 机械工程材料. 2001.(25)11. 5-10,13.

[9] 王海涛,韩恩厚,柯伟. 基于人工神经网络模型的铝合金大气腐蚀的预测[J]. 中国腐蚀与防护学报. 2006. (26)5. 272-274,281.

[10] 李润霞,李荣德,孙海军,刘贵立,李晨曦,胡壮麒. A354合金热处理制度的人工神经网络模型[J]. 铸造. 2004.(53)3. 228-230.

[11] 侯介山,周兰章,郭建亭,袁超. NiAl合金超塑性的人工神经网络预测[J]. 金属学报. 2013.(49)11. 1333-1338.

[12] 李章刚,李冰,张士宏,申卫华,张蓉霞,刘化民,张金利. 铜合金管材铸轧工艺设计专家系统的开发及应用[J]. 中国机械工程。2005.(16)23. 2101-2105.

[13] 李晓峰,王海涛,邵良杉. 基于人工神经网络的碳钢、低合金钢腐蚀预测[J]. 西安建筑科技大学学报(自然科学版). 2008.(40)6. 885-888.

[14] 王海涛,韩恩厚,柯伟. 用人工神经网络构建碳钢、低合金钢大气腐蚀模型[J]. 腐蚀科学与防护技术. 2006.(18)2. 144-147.

[15] 薛小怀,钱百年,于少飞,国旭明,杨柯. 熔敷金属力学性能人工神经网络预测法的应用[J]. 金属学报.2001.(37)9. 947-951.

[16]郭鹏. 基于神经网络的高温合金组织性能分析[M].西北工业大学.2004.2

[17] 刘雄飞,郭子静,陆琪. 人工神经网络在高温合金性能预测中的应用[J]. 2010年“航空航天先进制造技术”学术交流论文集. 190-194.

[18] 于洋洋,彭志方,王春水,闫光宗. 基于神经网络的镍基高温合金蠕变断裂寿命研究[J]. 计算机应用技术. 2005.(25)2. 96-98.

[19]徐喆. 基于HS-SVR算法的工炉合金成分控制模型的研究[M]. 东北大学. 2008.6

[20]Ruoqian Liu, Logan Ward, Ankit Agrawal etc.Deep Learning for Chemical CompoundStability Prediction[M]. KDD Workshop on Large-Scale Deep Learning for Data Mining. 2016.8. 13-17.

[21] Saswata Bhattacharya, Sergey V Levchenko, Luca M Ghiringhelli etc. Efficient ab initio schemes for finding thermodynamically stable and metastable atomic structures: benchmark of cascade genetic algorithms[J]. New Joural of Physics 2014(16). 1-34.

[22] Vasisht Venkatesh , H.J. Rack. A neural network approach to elevated temperature creep–fatigue life prediction[J]. International Journal of Fatigue 1999(21). 225-234.

[23] D.W. MacLachlan, G.S.K. Gunturi, D.M. Knowles.Modelling the uniaxial creep anisotropy of nickel base single crystal superalloys CMSX-4 and RR2000 at 1023 K using a slip system based finite element approach. Computational Materials Science. 25 (2002). 129–141.

[24] Yiğit M. Arisoy , Tuğrul Özel. Machine Learning Based Predictive Modeling of Machining Induced Microhardness and Grain Size in Ti–6Al–4V Alloy. Materials and Manufacturing Processes. 2015(30). 425-433.

[25] S.H. Hsiang, Y.W. Lin. Application of fuzzy theory to predict deformation behaviors

of magnesium alloy sheets under hot extrusion[J]. Journal of Materals Processing Technology. 2008(201).138-144.

[26] Y.S. Yoo a, C.Y. Jo a, C.N. Jones. Compositional prediction of creep rupture life of single crystal Ni base superalloy by Bayesian neural network[J]. Materials Science and Engineering. 2002(A336). 22-29.

[27] Gregory A. Landrum, Hugh Genin. Application of machine-learning methods to solid-state chemistry:ferromagnetism in transition metal alloys[J]. Journal of Solid State Chemistry. 2003.(176).587-593.

[28] Aaron Gilad Kusne, Tieren Gao1, Apurva Mehta. etc. On-the-fly machine-learning for

high-throughput experiments: search for rare-earth-free permanent magnets[J]. Scientific Reports. 2014(9).1-7.

[29] Ruoqian Liu, Abhishek Kumar, Zhengzhang Chen. A predictive machine learning approach for microstructure optimization and materials design[J]. Scientific reports.2015.7. 1-12.

[30] Y.C. Lin a, Jun Zhang b, Jue Zhong. Application of neural networks to predict the elevated temperature flow behavior of a low alloy steel[J]. computational Materials Science. 2008(43). 752-758.

[31] M. Talebi Anaraki , M. Sanjari , A. Akbarzadeh. Modeling of high temperature rheological behavior of AZ61 Mg-alloy using inverse method and ANN[J]. Materials and Design. 2008(29). 1701-1706.

[32] Ibrahim N. Tansel , Mustafa Demetgul ,Hasan Okuyucu & Ahmet Yapici. Optimizations of friction stir welding of aluminum alloy by using genetically optimized neural network. Int Adv Manuf Technol. 2010(48). 95-101.

[33] R.P. Cherian, L.N. Smith, P.S. Midha. A neural network approach for selection of powder metallurgy materials and process parameters[J]. Artificial Intelligence in Engineering. 2000(14). 39-44.

[34] G. Panoutsos, M. Mahfouf. GRANULAR COMPUTING AND EVOLUTIONARY FUZZY MODELLING

FOR MECHANICAL PROPERTIES OF ALLOY STEELS [J]. 16th Triennial World Congress, Prague,Czech Republic 2005, 205-210.

[35] Stefano Curtarolo, Gus L. W. Hart, Marco Buongiorno Nardelli. The high-throughput highway to computational materials design[J]. Nature materials. 2013.12. 191-201.

[36] Chris E. Mohn , Svein Stølen & Walter Kob. Predicting the Structure of Alloys Using Genetic

Algorithms[J]. Materials and Manufacturing Processes. 2011. 348-353

[37] Ye-fa TAN, Long HE, Xiao-long WANG, Xiang HONG, Wei-gang WAN. Tribological properties and wear prediction model of TiC particles reinforced Ni-base alloy composite coatings[J]. Transactions of Nonferrous Metals Society of China. 2014(24). 2566-2573.

[38] 韩敏,徐俏,赵耀,林东,杨溪林. 基于收得率预测模型的转炉炼钢合金加入量计算[J]. 炼钢. 2010.(26)1. 44-47.

[39] 王莉,周新东. VPRS和LS\_SVM的联合建模对于金属粉末性能的测定[J]. 科技世界. 2010. 147-149.

[40] 张萤,李颖,谷艳红,郭豪,黎娜. 基于LIBS技术的钢铁合金中Cr和Ni元素SVM 定量分析方法研究[J]. 光谱学与光谱分析. 2016.(36)7. 2244-2248.

[41] 田高峰,陈阳,周磊,武丹,邹金文. 粉末髙温合金r’相溶解温度的成分敏感性研究[J]. 第十三届中国高温合金年会大摘要文集. 190.

[42] 尹欣,王玉,赵俊敏,张辉. 基于遗传神经网络的GH4169高温合金摩擦焊超声检测缺陷识别[J]. 机械设计与制造. 2008(5). 113-115.

[43]李章先,吴基球,材料科学与工程中应用ANN的前景[J],中国陶瓷工业. 2003(10)4. 36-37

[44]张国英,刘贵立,曾梅光,人工神经网络在材料设计中的应用[J],材料科学与工艺, 1999.(7)3. 93-96.

[45] Malinov,W.Sha,J.J.MeKeown. Modelling the correlation between Proeessing Parameters and ProPerties intitanium alloys using artificial neural networks ComPutational Materials Seience. 2001. (21) 375-394.

[46] 张国英,刘贵立,曾梅光. 一种设计高强韧性钢材的新方法,宇航艺材料,2000(2).51-54.

[47]蔡煜东,宫家文,甘骏人,姚林声. 高氧化态( II—IV ) 三核金属簇合物构型的人工神经网络判别方法[J]. 计算机与应用化学, 1994(11)1. 32-35.

[48]桂忠楼,陈立江,人工神经网络在单晶合金设计中的应用[J],材料工程, 1992(5)2.

[49]Malinov,W.Sha,J.J.MeKeown.Modelling the Correlation between Proeessing Parameters and ProPerties intitanium alloys using artifieial neural network. ComPutational Materials Seience, 2001. 375-394.

[50] Ye-fa TAN, Long HE, Xiao-long WANG, Xiang HONG, Wei-gang WANG. Tribological properties and wear prediction model of TiC particles reinforced Ni-base alloy composite coatings[J]. Transactions of Nonferrous Metals Society of China. 2014(24). 2566-2573.

[51] 刘英莉,尹建成,姜瑛,钟毅.BP神经网络模型预测ZnCu2Al10合金的高温变形行为[J]. 稀有金属材料与工程. 2016(45)4. 1253-1256.

[52] 陈海生,冯 勇,马凡蛟,毛友川. 基于BP 网络Ti-6Al-3Nb-2Zr-1Mo 合金等温压缩流变应力预测[J]. 稀有金属材料与工程. 2016(45)6 1549-1553.

[53] 安迪,闫亮明,石阁,刘玉浩,李伟健. Mg-Zn-Zr-Y-Nd 合金高温压缩变形行为及流变应力ANN模型[J]. 轻合金加工技术。2016(44)10. 56-60.

[54] 熊缨,岑恺. 基于相对误差平方和的神经网络预测镁合金多轴疲劳寿命[J]. 机械工程学报。2016(52)4.73-81.

1. **研究内容**

单晶高温合金的发展趋势有两方面：提高合金的使用温度和延长使用寿命，其中改进凝固条件和热处理工艺是两条重要的途径。为了达到这个目标，在进行试验性的研究之前对所要研究对象的性能进行预测，根据预测的结果，调整单晶合金制备工艺参数，从而降低研究成本，缩短研发的时间。在此研究过程中，可以引入机器学习方法，分析影响单晶高温合金性能的各种因素及其关系，构建性能预测模型，从而提高性能预测的精度和效率，促进单晶高温合金的制备。

**2.1 基于特征选择的单晶高温合金性能影响因素分析**

2.1.1 单晶高温合金特征选择的必要性

由于单晶高温制合金备过程中的复杂性，数据中往往存在大量稀疏、不相关、冗余等特征，这些数据不能反映实际情况。由于不可测因素的变化而导致所测量的数据与正常的数据的偏离等会影响到对某个属性对性能影响的分析。特征选择的方法能够确定对单晶高温合金性能影响较大的因素，从而减少制备过程的复杂性，节约人力和财力。

2.1.2 单晶高温合金的特征选择方法

特征选择被称为属性选择或变量选择，特征选择就是依据某个标准，从一个 D 维的原始特征数据中挑选出最有效的 d (d <D)个特征，以达到降低特征空间维数的目的。用数学语言描述就是：从D 个度量值集合{x1, x2,..., xD}中，按某一准则 J 选择出最优的子集，达到降维（d维，d<D）的目的。从定义中可以看出，特征选择就是利用样本集内部信息，从待选的特征集合中选择一个（相对某种评价准则）最优特征子集的过程，这个特征子集应当保留原有特征集合的全部或绝大部分信息。

对单晶高温合金数据，本团队拟使用多层级过滤式特征选择方法和关联规则方法共同选择合适的特征。以关联规则为例，借助单晶高温合金的实验数据，分析属性值之间的关系、属性与单晶高温合金性能的关系，寻找在单晶高温合金制作过程中影响性能较大的属性，进一步缩短实验的时间和复杂性。

**2.2 基于集成学习的单晶高温合金性能预测方法**

基于机器学习的方法在复杂系统的建模方面更具优势。利用机器学习中的算法，对影响单晶高温合金制备中的成分-工艺-组织-性能的工艺参数进行分析，以及对未知的非线性关系的逼近，找到合金制备过程中实验控制参数等因素影响下，成分、组织及性能的变化，对其变化进行曲线拟合，建立从成分到性能的预测模型以及反应试验数据内在规律的数学模型，从而对单晶高温合金制备过程的参数控制进行优化，以达到指导试验的目的。

集成学习比单一的模型有更高的预测精度，所有本团队拟采用集成学习的方法，集成的模型拟选择支持向量机和神经网络等模型，已证明支持向量机一定可以将两类问题区分，而神经网络在这几年的各个应用领域都有着显著的成果和超高的准确率，并且有人已经将神经网络用到了材料性能预测方面。以集成学习算法AdaBoost为例，首先需要提取Haar特征；然后将Haar特征转化成对应的弱分类器；最后从大量的弱分类器中迭代选择出最优弱分类器；最初每个样本对应的权重是相同的，对于h1分类错误的样本，加大其对应的权重；而对于分类正确的样本，降低其权重，这样分错的样本就被突出出来，从而得到一个新的样本分布U2。在新的样本分布下，再次对弱分类器进行训练，得到弱分类器h2。依次类推，经过T次循环，得到T个弱分类器，把这 T 个弱分类器按一定的权重叠加（boost）起来，得到最终想要的强分类器。具体过程如下图1所示：

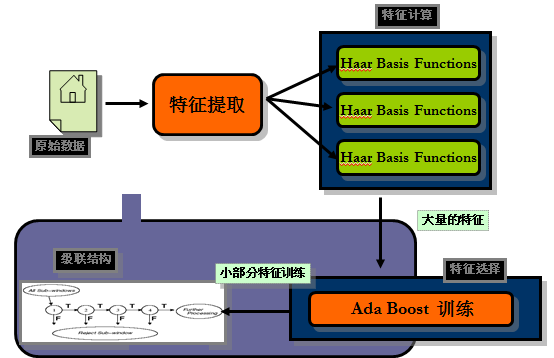


图1：AdaBoost算法的流程

**2.3 可解释性机器学习方法在单晶高温合金中的应用**

构建单晶高温合金制备过程中成分、工艺、组织和性能的云模型，基于云模型进一步提出云模型学习系统，对单晶高温合金制备进行学习。

在分析、预测材料性能中，影响单晶高温合金材料的组织和性能的因素多而且复杂，特别是对于新材料，其成份、工艺、组织和性能以及使用之间的关系，内在规律复杂尚不清楚，材料的设计都涉及到这些关系。基于机器学习方法建立的模型能从己有的实验数据中自动归纳出规律,并可以利用经训练好模型直接进行推理，用于对单晶高温合金材料组织结构的设计和性能预测。

**3.创新点**

1、提出多层级的特征选择方法与特征评价体系

目前的特征选择方法，虽然在一定程度上解决了数据的稀疏、不相关、冗余等问题，但是也加大了重要特征被剔除的风险，尤其在数据量较少的高温合金领域。本课题拟提出一种基于专家经验的特征评价体系，结合专家知识与机器学习方法设计特征重要程度的度量方法。

2、建立高温合金性能预测方法

现有的性能预测方法主要使用单一模型，泛化能力不强。集成学习是机器学习中常用的模型集成方法，可以提高预测精度与泛化能力，但在方法选择与结果集成策略上可解释性较弱。本课题拟提出结合专家知识的方法选择策略，进而提出一种基于集成学习的单晶高温合金性能预测方法。

3、建立基于云模型的方法解释模型

当前的机器学习方法可解释性较弱，模型中得到的结果无法与传统的专家知识对接。基于此，本课题拟利用云模型的高可解释性，对高温合金性能预测方法进行解释，进而使机器学习真正融入到高温合金领域，推动高温合金领域向前发展。