

引用格式: 邢艺锋, 尹奥博, 耿粒伦, 等. 单晶合金与防护涂层智能设计进展[J]. 航空材料学报, 2024, 44(5): 70-85.

XING Yifeng, YIN Aobo, GENG Lilun, et al. Advances in intelligent design of single crystal superalloys and protective coatings[J]. Journal of Aeronautical Materials, 2024, 44(5): 70-85.

单晶合金与防护涂层智能设计进展

邢艺锋¹, 尹奥博¹, 耿粒伦¹, 杨帆¹, 茹毅^{1,2}, 赵文月^{1*},
裴延玲¹, 李树索³, 官声凯^{1,2}

(1. 北京航空航天大学材料科学与工程学院, 北京 100191; 2. 天目山实验室, 杭州 311115; 3. 北京航空航天大学航空发动机研究院, 北京 100191)

摘要: 随着航空发动机涡轮前温度的不断提升, 研发新一代航空发动机涡轮叶片用单晶高温合金及其热防护涂层迫在眉睫。为了满足航空发动机复杂的服役环境对高温结构材料综合性能提出的严苛要求, 在材料集成计算工程与材料信息学的推动下, 近年来国内外逐步开展了单晶高温合金与热防护涂层的智能设计研究, 以提高研发效率、降低研发成本。本文重点综述多尺度计算模拟与机器学习方法在推动新型单晶高温合金与热防护涂层设计上的最新研究进展, 确证了多尺度计算模拟为揭示单晶高温合金强化机理与热防护涂层抗氧化、阻扩散机制所提供的有效理论支撑, 展现机器学习在构建高温结构材料“成分-组织-性能”内禀关系上的可靠性与巨大潜力, 为新一代高温单晶高温合金与热防护涂层提供了智能高效的快速研发新路径。

关键词: 计算模拟; 智能设计; 镍基单晶高温合金; 防护涂层

doi: 10.11868/j.issn.1005-5053.2024.000109

中图分类号: V252; TG132.3⁺2

文献标识码: A

文章编号: 1005-5053(2024)05-0070-16

Advances in intelligent design of single crystal superalloys and protective coatings

XING Yifeng¹, YIN Aobo¹, GENG Lilun¹, YANG Fan¹, RU Yi^{1,2}, ZHAO Wenyue^{1*},
PEI Yanling¹, LI Shusuo³, GONG Shengkai^{1,2}

(1. School of Materials Science and Engineering, Beihang University, Beijing 100191, China; 2. Tianmushan Laboratory, Hangzhou 311115, China; 3. Research Institute of Aero-Engine, Beihang University, Beijing 100191, China)

Abstract: As the turbine inlet temperatures of aero engines continue to rise, there is an urgent need to develop a new generation of single-crystal superalloys and their thermal protective coatings for turbine blades. In order to meet the stringent requirements for the comprehensive performance of high-temperature structural materials in the complex service environments of aero engines, the intelligent design research of single crystal superalloys and thermal protection coatings has been gradually carried out at home and abroad in recent years under the promotion of material integrated computational engineering and material informatics. This paper reviews the latest research progress in the design of novel single-crystal superalloys and thermal protective coatings by utilizing multi-scale computational simulations and machine learning methods. The findings confirm that multi-scale computational simulations offer robust theoretical support for understanding the strengthening and toughening mechanisms of single-crystal superalloys, as well as the oxidation resistance and diffusion protective mechanisms of thermal protective coatings. Additionally, the study highlights the reliability and significant potential of machine learning in constructing intrinsic "composition-structure-property" relationship for high-temperature structural materials. This approach paves an intelligent and efficient new pathway for the rapid development of next-generation high-temperature single-crystal superalloys and thermal protective coatings.

Key words: computational simulation; intelligent design; Ni-based single crystal superalloys; protective coatings

航空发动机是飞机的核心动力系统,是20世纪最伟大的工程成就之一^[1]。随着发动机燃油效率的提升,涡轮前温度不断提高,对涡轮叶片材料的承温能力要求也更为严苛。从材料设计角度,提升涡轮前进口温度主要有两种途径,其一是设计具有更高承温能力的叶片材料,其二则是设计适用于叶片材料的表面热防护涂层。镍基高温合金由于具有优异的综合性能被选作先进航空发动机叶片材料。为了满足不断提升的力学性能要求,随着定向凝固技术的发展,镍基高温合金的铸态组织由最初的等轴晶发展为择优取向柱状晶,最后借助精准取向控制的单晶生长技术发展为目前的单晶高温合金。此后,单晶高温合金承温能力的进一步提升主要依赖合金成分的设计与优化,目前第五代镍基单晶高温合金的承温能力已可达1140℃^[2]。然而,未来新一代航空发动机的目标推重比为15~20,其涡轮前温度将高达约2400K,这使得高压涡轮工作叶片材料需承温1150℃,高压涡轮导向叶片材料需承温1200℃以上^[3-4],该目标服役温度均已逼近单晶高温合金材料极限,新型高承温单晶合金的研发极具挑战,且研发周期长、成本高。此外,为了应对航空发动机涡轮复杂严苛的服役环境,进一步提高叶片的抗氧化腐蚀性能,通常还需在单晶高温合金表面涂覆热防护涂层。为了缓解金属与陶瓷间的热膨胀不匹配,制备有金属黏结层,但其与基体单晶高温合金仍存在成分与组织的显著差异,导致服役过程中涂层/单晶高温合金界面处不可避免地发生元素互扩散与微观组织演变,从而损害单晶高温合金的组织稳定性与力学性能^[5]。因此,热防护涂层的设计需兼顾其抗氧化腐蚀性能及其与单晶高温合金的相容性。

单晶高温合金及其热防护涂层的服役性能均与纳观尺度原子扩散、微观尺度缺陷演变与运动、介观尺度相组织演化、宏观尺度裂纹萌生与扩展等多尺度、多层级行为密切相关^[6-11],这为其服役环境下微观组织与力学行为的精准实验表征提出了巨大挑战,仅依赖实验手段与理论模型揭示单晶高温合金及其热防护涂层的“成分-组织-性能”复杂内禀关系异常困难。因此,在大力发展近工况条件下材料原位无损表征技术的同时,亟待突破传统理论物理模型瓶颈,借助计算材料学建立材料理论研究与实验研究的桥梁,通过在不同空间和时间尺度上计算、模拟、分析和预测材料的成分分布、组织结构、缺陷性质与力学行为等,为单晶高温合金及其热防护涂层的设计与优化提供可靠物理信息与

有效理论指导。

尽管如此,航空发动机叶片用单晶高温合金-热防护涂层体系具有复杂的组织结构和多种元素交互作用,而复杂材料体系的大规模多尺度计算模拟和高通量材料表征筛选仍为目前的瓶颈难题,亟待巨大的成分设计空间中快速确定有效的设计优化路径。随着人工智能的兴起,学术界提出了AI for Science的研究新范式,材料界也涌现了数据驱动的材料研发新路径^[12],通过构建航空发动机材料“成分-工艺-组织-性能”的机器学习关系模型,有望加速其成分设计与组织调控,推进材料智能制造,实现航空发动机新材料的低成本快速研发。本文重点梳理综述单晶高温合金与热防护涂层智能设计的最新研究进展,并对其未来发展趋势进行展望。

1 单晶高温合金多尺度计算模拟研究进展

1.1 单晶高温合金微观热力学与关键元素行为

镍基单晶高温合金标准热处理态组织的典型显微组织如图1所示^[13],包含 γ -Ni基体相、 γ' -Ni₃Al析出相和 γ/γ' 相界面。 γ -Ni相是面心立方结构(face-centered cubic, FCC)的Ni无序固溶体,几乎所有情况下它形成连续的基体相,其他相则依附于基体相。 γ 相具有较低的弹性模量、良好的高温塑韧性和高温稳定性,是镍基单晶高温合金高温组织保持稳定的基础,从而保证合金在接近熔点附近的高温下服役。 γ' -Ni₃Al相是镍基单晶高温合金中最主要的析出强化相,L1₂有序结构,其中Ni原子占据面心立方结构的面心位置、Al原子占据角点位置。 γ' 相在多级时效热处理中从过饱和 γ 相中析出,以颗粒状或立方形态分布在 γ 基体中,形成独特的两相结构。 γ' 相从 γ 相析出后形成 γ/γ' 相界面。由于 γ 和 γ' 相两相间晶格常数差异较小(室温下测定的晶格常数分别为 $a_\gamma = 0.352$ nm, $a_{\gamma'} = 0.356$ nm), γ/γ' 相界面呈现出共格相界面,其法向通常沿 $\{100\}$ 晶向,但合金化使两相晶格常数存在差异,仍会产生一定程度的相界面错配度,有研究表明,更负的错配度能显著提高合金长期组织稳定性和蠕变断裂寿命^[14]。

单晶高温合金通常添加多种合金化元素以获得优异的高温服役性能,阐明单晶合金中这些合金化元素的行为及微观机理,对于指导新型合金的成分设计至关重要。其中,保持多组元体系热力学稳定性是合金长时服役的基础。研究典型强化元素的优先占位、两相分配行为、相界面/缺陷局域分布

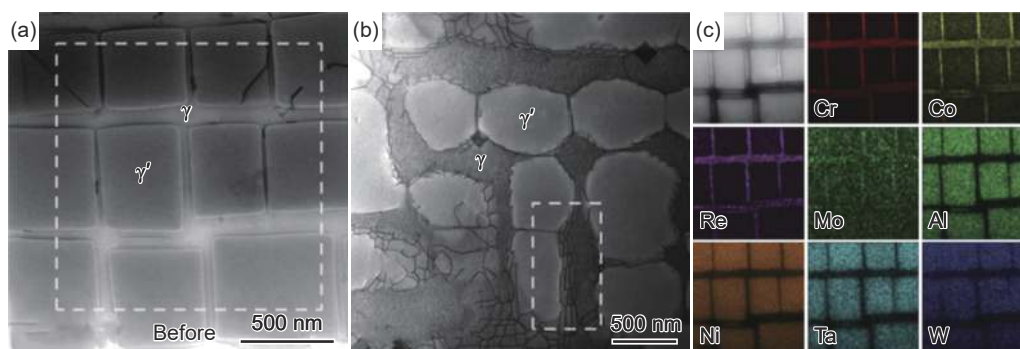


图1 镍基单晶超合金的初始微观结构^[13] (a)、(b)样品在老化处理前后的典型微观结构;(c)通过 EDS 获得的 (a)中虚线矩形所示区域的元素分布图

Fig. 1 Initial microstructures of Ni-based single-crystalline superalloys^[13] (a), (b) typical microstructures of samples before and after aging treatment; (c) elemental distribution maps obtained by EDS of area indicated by dashed rectangle in Fig. (a)

等均有利于加深对单晶高温合金稳定性及微观强化机理的认识,尤其是为阐明多种合金化元素间的复杂交互作用奠定坚实的理论基础。

γ 相包含高浓度的 Co、W、Cr、Mo、Re 和 Ru 等元素,这些合金化元素的加入能够进一步提高组织稳定性,提高固溶强化效应,补偿温度升高时 γ -Ni 相弹性性能的影响,体模量 B_H 、剪切模量 G_H 、杨氏模量 E 和泊松比 ν 是表征材料弹性性能的基本参数,能够反映材料抵抗弹性变形的能力,研究结果表明体模量与合金元素 d 层电子数有关,表现出“抛物线”趋势,在 d 层电子数等于 5 也就是半满时,体模量达到最大值。Hu 等^[16]通过第一性原理与动力学蒙特卡洛相结合的方法研究了 Ni-Re、Ni-Mo、Ni-Re-Mo 体系中 Ni 自扩散行为,认为单个 Re 原子与单个 Mo 原子对 Ni 自扩散行为所产生的相似影响均降低了 Ni 扩散系数,双原子对中 Mo-Re 合金原子对 Ni 自扩散行为的影响最为强烈。

γ' -Ni₃Al 相作为高温合金中的强化相,其性能一直是研究热点。Gong 等^[17]通过第一性原理计算,明确 Mo、Ta、Re 和 Cr 等单一合金元素在 γ' -Ni₃Al 相中的优先占位行为,即这些元素均倾向于占据 Al 晶格位置。此外,所有合金化体系的形成能均为负值,这一发现从热力学角度证明这些合金元素掺杂的稳定性。进一步的计算结果显示,单独引入这些合金化元素能够显著提升体系的模量,特别是 E 和 G_H ,从而增强 γ' -Ni₃Al 相在高温和载荷作用下的抗变形能力。尤为突出的是,Mo-Re 原子对在取代 Al-Al 位点时展现出了最佳的强化效果。Hao 等^[18]研究结果表明共合金的强化效果来自合金化原子与最近邻 Ni 原子之间电荷富集以及合金化原子-d 轨道和 Ni-d 轨道杂化。化学键合的增强

影响了 γ' -Ni₃Al 相的弹性性能。除此之外, Yang 等^[19]通过深度学习方法构建了 Ni 基单晶高温合金的蠕变断裂寿命预测模型,创新性地深度神经网络中引入先验物理约束,基于 Transformer (一种用于处理序列数据的神经网络架构)中的自注意力机制(self-attention)在单晶高温合金的表示中引入合金化信息传递,实现合金化元素交互的表示学习。模型捕捉到 Mo-Re-Ru、Mo-Ta-W、Cr-Ru-Mo 等关键合金化元素复杂交互作用,且在 Mo-X (合金化元素)间的注意力分数中,Re 最高,结果表明 Mo-Re 间可能存在交互作用。该结果与 Hu 等^[16]动力学蒙特卡洛和 Gong 等^[17]第一性原理结果一致。

实验研究中发现合金化元素在 γ/γ' 相界面附近发生元素偏析,影响相界面稳定性和强度,而元素优先占位及其对 γ/γ' 相界面稳定性的影响是研究 γ/γ' 相界面的基础。Zhao 等^[20]和 Li 等^[21]通过第一性原理计算典型合金化元素 X (X =Mo、W、Cr、Ta、Re)在 γ/γ' 相界面附近格点的替位研究结果表明,单合金化原子 X 反应一致,均优先占据靠近相界面 γ 相一侧的 γ -cp 位。对于 Re- X 双合金化原子,处于优先占位的 Re 原子并不会影响合金化原子 X 在相界面附近的优先占位。不论是单合金化原子还是双合金化原子,合金原子处于优先占位时会增加相界面稳定性,并且双合金化原子相比单合金化原子更有利于相界面稳定性。

保持相界面稳定是实现相界面强化的基础,相界面附近的元素分布以及不同取向、扭转下的相界面稳定性研究具有重要意义。实验发现 γ/γ' 共格相界面的宽度在微米甚至在纳米尺度范围内,但对相界面更进一步的研究难以通过现有实验手段实现。基于原子尺度的计算模拟,能够实现合金化元

素对 γ/γ' 相界面稳定性影响的机理研究。Li 等^[21] 首次提出层浓度, 此概念用于表征沿相界面垂直方向上合金化元素的浓度, 从而评价相界面附近的元素分布。单合金化与双合金化原子 X 在 γ/γ' 相界面附近的层浓度如图 2 所示^[21], 单合金化原子 Mo、W、Cr 和 Re 均表现为在最邻近 γ/γ' 相界面 γ 相一侧(γ -1 层)具有最大层浓度。在双合金化原子 Re- X 置换体系中, 由于 Re 原子处于 γ -cp 优先占位, 与 Re 元素的相互吸引作用使得 Mo、W、Cr、Ta 和 Re 都更倾向于固溶在 γ 相一侧, 特别是最近邻 γ -1 层。Zhao 等^[22] 通过基本的不可逆热力学将最常见的相场方程与经典热力学第一定律和第二定律联系起来, 通过区分准静态场和相变所引起的序参数变化规律, 阐明了结构、铁电和铁磁相变过程中长程弹性、静电和磁相互作用对畴结构演变的贡献。他们进一步采用微观方程相场法 (microscopic equation phase-field method, MPFM) 研究了 1050 K 下 $\text{Ni}_{75}\text{Al}_{11}\text{V}_{14}$ 合金时效过程中 γ' 与 γ 相之间相界 (PBs) 的演变和稳定性。通过原子构型、迁移和占据概率的分析, 发现了 $(100)_{\text{L}}//$

$(100)_{\text{L}}$, $(200)_{\text{L}}/(200)_{\text{L}}$, $(100)_{\text{L}}/(100)_{\text{L}} \cdot \frac{1}{2}[100]$, $(100)_{\text{L}}/(200)_{\text{L}} \cdot \frac{1}{2}[100]$ 四种类型的相界。本研究追踪并探讨了亚稳相界的演变和稳定相界的形成, 同时通过将微观弹性理论与 MPFM 相结合, 研究了相干弹性应变能对相界演化和稳定性的影响^[23]。Yang 等^[24] 分子动力学模拟研究结果表明, $\{010\}$ 、 $\{110\}$ 和 $\{111\}$ 稳态界面具有不同的特征, 以 $\text{Ni}/\text{Ni}_3\text{Al}$ 界面为例, 可以看出 $\text{Ni}(001)/(001)\text{Ni}_3\text{Al}$ 、 $\text{Ni}(\bar{1}\bar{1}0)/(\bar{1}\bar{1}0)\text{Ni}_3\text{Al}$ 界面均呈现出矩形错配位错网, $\text{Ni}(111)/(111)\text{Ni}_3\text{Al}$ 界面则由于错配位错在界面 (同时也是两组成相的滑移面) 内分解成部分位错而形成了螺旋型位错网络。高层错能组成相的引入与窄位错间距的耦合作用, 带来了新的错配位错分解机理, 其比此前研究中低层错能组成相中的案例更加复杂。新机理的几点特性总结如下: 部分形核位置受到抑制, 指向单一相中的 V 型层错结构转变为指向界面两侧不同相中的对称分解, 形核方向完全改变。对比常规分解后的缺陷构型, 基于新的机理分解后的缺陷构型提供了对点阵位错传输不同的抗力, 因此能够调控相应材料体系的塑性变形行为。

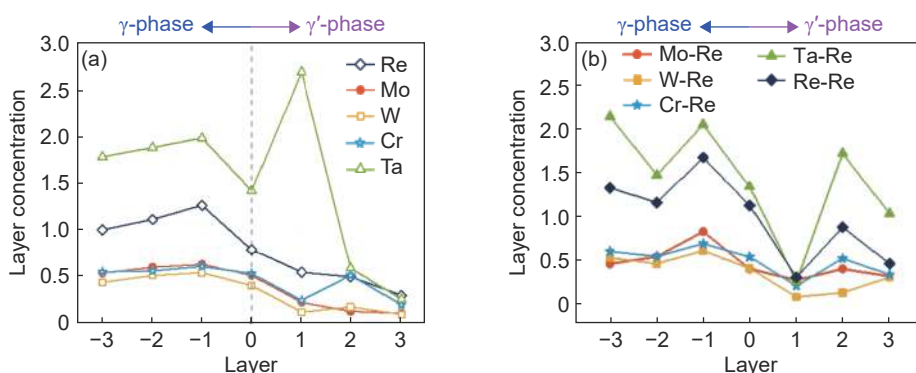


图 2 单合金化原子体系(a)与双合金化原子体系(b)在相界面附近的层浓度^[21]

Fig. 2 Layer concentration near phase interface^[21] for single-alloyed atomic system (a) and double-alloyed atomic system (b)

1.2 单晶高温合金微观强韧化机理

单晶高温合金的强韧化主要来源于 γ -Ni 基体相强化、 γ' - Ni_3Al 析出相强化和 γ/γ' 相界面强化。 γ -Ni 作为镍基单晶高温合金塑性变形主体, 在蠕变过程的初始阶段, 受外部施加应力或内部错配应力的驱动, 位错在 γ 相中移动。此过程中, γ 相的固溶强化作为增强 γ 相性能的主导机制, 该机制源自于固溶原子与基质原子间存在的尺寸不匹配, 这种不匹配进而引发了晶格畸变。晶格畸变显著提升了位错运动时所遇到的阻碍, 从而实现了 γ 相基体强化。在镍基单晶高温合金中添加 Co、W、Cr、Mo、Re、Ru 等合金化元素均可起到明显的固溶强化作用。

除固溶强化, 通过降低 γ 相中的层错能可增加扩展位错间距, 阻碍其束集, 阻碍位错绕过第二相。因此在 γ 相中, 层错能可以表征 γ 相本征强度。为了揭示 Mo 在 γ 基体中的强化机制, Zhao 等^[25] 采用结合相干势近似的精确饼模轨道理论 (exact muffin-tin orbital within coherent potential approximation, EMTO-CPA) 方法计算研究了 0 K 和高温下 Ni-Mo 体系的广义层错能, 该研究详细展示了 0 K 和高温下 Ni-Mo 固溶体中 Mo 浓度与层错能之间的关系。Hu 等^[26] 研究表明与 Mo 的均匀合金化相比, 层错面上的 Mo 偏析对广义堆垛层错能的影响更强, 有助于改善镍基固溶体的孪生倾向。

在蠕变的中后期,镍基单晶高温合金想要进一步发生塑性变形需要位错切过或绕过 γ' 相。由于 γ' 相为 $L1_2$ 结构而 γ 相为FCC结构, γ 相中的 $a[10\bar{1}]$ 全位错需要以分解的方式切入 γ' 相,通常情况下,位错进入 γ' 相有以下两种典型的形式:

$$a[10\bar{1}] = \frac{a}{2}[10\bar{1}] + \text{APB} + \frac{a}{2}[10\bar{1}] \quad (1)$$

$$\begin{aligned} a[10\bar{1}] &= \frac{a}{3}[2\bar{1}\bar{1}] + \text{SiSF} + \frac{a}{3}[11\bar{2}] \rightarrow \frac{a}{3}[11\bar{2}] + \frac{a}{6}[1\bar{2}1] \\ &= \frac{a}{2}[10\bar{1}] + \text{APB} \end{aligned} \quad (2)$$

位错切过 γ' 相很明显需要克服一个最小能量,其大小等于反相畴界(anti-phase boundary, APB)能。其结果是 γ' 相有序结构被破坏,从而阻止位错滑移,这种强化称之为有序强化。因此APB形成能可以表征 γ' 相本征强度,研究点缺陷及合金化原子对APB能的影响是十分必要的。Hu等^[27]通过第一性原理研究本征点缺陷包括反位缺陷、空位及合金溶质Mo、Re、W和Ta对 γ' -Ni₃Al的 $\{111\}$ APB能的影响。结果表明单合金化原子在APB附近都是能量有利的,而Mo取代相对不利。而NiAl反位和空位缺陷降低APB能,而大多数AlNi反位缺陷增强APB能。这主要是由于AlNi/NiAl反位缺陷附近Ni—Al键和有序能的减少/增加所致。同时研究发现,空位合金化溶质缺陷会使得APB能大幅减少。APB能除了影响 γ' 相本征强度外,APB能的各向异性为位错从 $\{111\}$ 平面到 $\{001\}$ 平面的交滑动提供驱动力^[28]。

γ 相中的位错会与相界面位错发生反应,从而阻碍位错切入 γ' 相,另一方面位错塞积在 γ/γ' 相界面附近形成界面位错网阻碍位错的进一步运动,这就是界面强化。格里菲斯断裂功和界面附近的位错行为可以表征 γ/γ' 相界面强度。格里菲斯断裂功定义为将相界面分开为两相结构时所需要做的功,可用于表征相界面的理想强度。不论是单合金化原子X还是双合金化原子Re-X^[20-21],当它们占据 γ' 相格点时都呈现出比占据 γ 相格点更高的格里菲斯断裂功,表明合金化原子在相界面 γ' 相一侧时对相界面的强化作用更强。此外,对具有单个 γ' -Ni空位体系研究时,发现Ni空位会明显削弱 γ/γ' 相界面的结合强度。而即使附近有Ni空位, γ' 相中合金化原子占据Al格点能够提高 γ/γ' 相界面的结合强度,其中Re表现出最佳的强化效果。 γ 相 γ' 相的晶格常数不同,在二代及之后单晶高温合金中有大量Re和Ru等 γ 相固溶强化元素,使 γ 相晶格常数略大于 γ' 相,因此在两相界面处存在错配应力场,

Zhang等^[29]研究发现界面错配应力场可显著影响合金蠕变过程中的位错运动,进而影响合金抗蠕变性能。Li等^[30]通过分子动力学模拟研究了不同温度下 γ/γ' 相界面错配位错网演化以及应力分布,结果表明随着温度和弛豫时间的增加, γ 相应力逐渐增大, γ 相位错次数增加,从位错网络破坏的界面切入 γ' 相。研究结果为理解镍基单晶高温合金位错演化和力学性能的温度依赖性提供了重要信息。分子动力学从微观尺度揭示了合金界面强化的内在机理。在此过程中,原子间相互作用势函数作为分子动力学模拟不可或缺的输入文件,其准确性直接决定了模拟结果的可信度与精确性,这凸显了势函数在分子动力学研究中的至关重要性。目前,构建这类势函数的方法主要分为两大类:一是基于半经验或全经验的传统方法,二是新兴的机器学习技术。在传统方法中,尽管已经成功开发了适用于镍基单晶高温合金的多种势函数,如Ni^[31]、Ni-Al^[31]、Ni-Al-Re^[32]、Ni-Al-Co^[33]等,但这些函数在面对高温合金复杂多变的成分体系时,往往显得力不从心,难以全面捕捉各元素及其相互作用的精细效应。鉴于高温合金成分的极端复杂性,为了更精准地解析元素间的相互作用及其对合金性能的影响,开发一套精确的多组元势函数显得尤为重要且迫切。然而,传统方法在此类复杂体系中的局限性日益凸显,构建过程既繁琐又难以保证高效与精准。在此背景下,机器学习技术以其强大的数据处理与模式识别能力,为势函数的构建带来革命性的变革^[34]。特别是以Zhang等^[35]开发的DeepMD-kit为代表的深度学习工具,显著提升了势函数的构建效率与预测精度,为多元复杂体系的分子动力学模拟开辟了一条全新的路径。

此外,除固溶强化、第二相沉淀强化及晶界强化等经典强韧化机理外,由于单晶合金中晶界强化元素的减少,任何与应力主轴方向垂直的晶界或再结晶晶粒的生成都可能成为裂纹萌发的源头,进而显著降低合金的蠕变寿命。因此,铸态再结晶行为对合金强韧性的影响不容忽视。Long等^[36]提出采用黏弹塑性行为模型来预测熔模铸造过程中镍基单晶高温合金的再结晶。利用非等温实验结果对该行为模型进行了进一步的验证。该方法能够预测高塑性位置,这些位置在后续热处理后会再结晶。Wang等^[37]通过结合实验观察与基于晶体塑性变形的有限元模拟,深入研究了高铝镍基单晶高温合金在不同热处理温度下的再结晶行为。

1.3 涡轮叶片结构约束下的单晶高温合金宏观行为

据统计,涡轮进口温度平均每年提高 20 K,但是叶片材料的承温能力每年提高只有 8 K 左右,其余部分只能通过叶片的冷却技术来实现。这使得叶片朝着结构复杂化、壁厚减薄化等方向发展,更复杂的内腔结构以及更先进的冷却技术在提高发动机涡轮进口温度的同时,还为叶片的性能带来了诸多挑战。涡轮叶片的结构约束主要包括打孔、曲度、复杂的几何形状以及不同厚度。这些约束条件不仅影响叶片的应力分布和变形行为,还决定了单晶高温合金在叶片中的宏观表现。打孔设计会影响叶片的冷却效果和应力集中情况;曲度和复杂的几何形状则决定了叶片的流场分布和气动性能。气膜冷却已在航空发动机涡轮叶片上广泛使用,叶片上的气膜孔通过冷却流体在壁面上形成的气膜将高温燃气与叶片隔绝从而实现叶片的高效冷却,但是气膜孔及其制备过程中对孔周组织的改变都会对叶片的性能造成一定的负面影响。气膜孔的制备会使单晶合金的铸造行为发生改变,快速凝固、温度再分布、溶质重新分配等过程导致孔周形成再铸层,其微观组织为 γ 相和较少的圆形 γ' 相,且其组织结构与厚度有关。

Shang 等^[38]通过数字图像相关(digital image correlation, DIC)和有限元模拟研究了气膜孔对镍基单晶高温合金试样高温拉伸行为的影响。发现孔和重铸层都会对拉伸性能产生不利影响,带有气膜孔的试样较无气膜孔试样来说屈服强度有所降低,而断后伸长率则明显下降,并且再铸层越厚,屈服强度以及断后伸长率降低得越显著。他们分别对薄壁有无气膜孔试样进行有限元模拟计算,分析其应力、应变分布,结果表明完整无孔试样整个试样的 σ_{yy} 、 τ_{RSS} 应力分布均匀;试样带有薄再铸层时孔边的 σ_{yy} 呈“X”状分布,且其 τ_{RSS} 应力分布不均匀。当无孔试样 $\tau_{RSS} > \sigma_P$ 时, $[101](1\bar{1}\bar{1})$ 滑移系立即被激活并开始塑性变形。而对于带有薄再铸层的试样,孔边的屈服情况还取决于孔的位置与分布,在孔的应变集中的位置, τ_{RSS} 应力远大于 σ_P ,这就使得试样在这些位置更容易发生塑性变形。对不同温度下的拉伸行为进行有限元模拟发现,随着温度从 20 °C 升高到 980 °C,断裂机理从滑移分离变为颈缩-凹坑。之所以产生这种现象,是因为高温下的塑性变形是由通道内的位错和较少位错对剪切 γ' 相引起的,而不是室温下单根位错剪切进入两相结构。

2 热防护涂层多尺度计算模拟研究进展

2.1 新型 β -NiAl 涂层中的活性元素作用机制

金属间化合物 NiAl 因具有熔点高(1638 °C)、低密度(5.90 g/cm³)、较高的杨氏模量(240 GPa)及优异的抗高温静态氧化性能等优良特性而受到青睐,成为一种十分有潜质的黏结层材料。然而, β -NiAl 作为热障涂层黏结层的候选材料还面临一些挑战,存在的主要问题有:(1)室温塑性差和高温强度低;(2) β -NiAl 涂层在高温氧化过程中氧化膜/涂层界面孔洞的形核与生长以及生长应力和热应力产生的氧化膜褶皱导致 α -Al₂O₃ 膜黏附性较差,在循环氧化环境下极易剥落,使得涂层失去对高温合金基体的保护;(3)在高温环境中 β -NiAl 涂层与高温合金基体之间的互扩散现象非常严重。鉴于 NiAl 涂层体系存在的上述问题,人们通过添加活性元素(reactive elements, REs)对 β -NiAl 涂层改性,大量的实验研究表明, REs 改性能大幅改善 β -NiAl 涂层的性能缺陷。针对活性元素的作用机理提出了多种模型,但这些模型均存在一定的局限性,目前对于活性元素的作用机理还存在很大的争议。因此,为了更好地理解活性元素效应并加以应用,必须从原子尺度上进行更深入的研究。例如,阐明活性元素与合金基体元素、微观缺陷等的交互作用机制;结合高分辨电镜、第一性原理计算等,揭示活性元素对氧化膜形核生长、氧化膜/合金界面微观结构的影响机理等。

为明确 REs 对 β -NiAl 热稳定性的影响, Hu 等^[39]通过第一性原理计算发现 Hf、Zr、Y、Dy、La 五种活性元素在 β -NiAl 中都倾向于占据 Al 位,这是由于这几种活性元素与 Al 元素无论在原子半径还是电子结构上都更为接近。且五种体系形成能均为负值,说明上述体系均能稳定存在。在高温下 β -NiAl 金属基体上生长了一层热生长氧化物(Al₂O₃),两者之间形成了典型的界面体系,其在循环氧化实验中充当了最弱的连接作用,在影响涂层失效中起到关键作用。Zhang 等^[40-41]通过第一性原理方法计算表明, β -NiAl 种加入 REs(Hf、Zr、Y、Dy、La)后提高了 β -NiAl/Al₂O₃ 界面结合强度,主要原因是 REs 能够与 S 元素发生反应,抑制 β -NiAl/Al₂O₃ 界面处 S 偏析,从而显著提高涂层的抗高温氧化性能。除了对 β -NiAl 氧化热力学方面的研究外, Roy 等^[42]还通过随机原胞方法(stochastic cellular automata, CA)对 β -NiAl 和 β -NiAl+Hf 的氧

化动力学进行二维模拟,此方法能够模拟 Al_2O_3 厚度、形态、质量变化以及近似计算 Al_2O_3 中应力应变。该模拟得到的结论为晶界导致未掺杂的 $\beta\text{-NiAl}$ 快速氧化,而掺杂 Hf 时,会导致 $\beta\text{-NiAl}$ 缓慢地生长 Al_2O_3 并形成平面的 $\beta\text{-NiAl}/\text{Al}_2\text{O}_3$ 界面,该结果与实验以及第一性原理计算符合较好。

2.2 涂层/单晶合金界面互扩散与组织演变机理

高温合金和涂层在化学成分、相组成以及微观结构上有着显著的不同。受到化学势梯度、温度梯度和应力梯度的影响,这会导致涂层与高温合金之间的元素扩散^[5]。涂层与合金界面新相形成时,合金近表面 $\gamma\text{-}\gamma'$ 组织也会被破坏,最终使高温合金的长期组织稳定性和力学性能恶化^[43-48]。

涂层-单晶合金体系组元复杂,相组成繁多,根据 Onsager^[49] 对菲克定律的推广表明,对于包含 n 种元素的扩散方程,需要 $(n-1)^2$ 个方程才能对其进行求解,对于高温合金这种复杂的合金体系来说,工作量巨大,且由于涂层/合金界面发生的反应扩散行为,常常导致新相生成,与二元扩散偶的情况大相径庭,通过大量实验也很难准确定量描述涂层/合金界面的扩散行为。针对类似的复杂多元多相扩散问题,可以采用计算方法进行研究。

Larsson 等^[50] 提出的均质化模型,采用热力学-动力学耦合方法模拟涂层系统中同时发生的氧化、扩散和溶解过程。Yuan 等^[51-53] 利用 DICTRA 模拟界面互扩散的基础上(考虑 Hashin-Shtrikman 下界),同时考虑边界上由于氧化所造成的 Al 的损失,Al 的损失速率由实验计算得出,并通过 Matlab 进行模拟。这种方法对于等温热暴露的模拟效果很好,但无法捕捉在热循环过程中由于严重的尺度剥落而造成的 Al 消耗。除此之外,还可通过设置边界条件(恒定通量或表面恒定活度)为所考虑的特定情况提供合理的模拟结果^[54-55]。由于 MCrAlY 涂层成分范围较宽,涂层中 Al、Cr 等元素化学势受涂层成分影响较大,因此合理设计涂层成分组织能够有效改善涂层/合金界面元素互扩散行为, Geng 等^[56] 通过实验结合热力学计算,对一种高 Mo 单晶高温合金的涂层成分进行了设计,评价了三种结构富 Mo 的 TCP 相在 γ' 相中析出的临界合金成分,反应涂层中 Al 和 Cr 元素向合金中扩散量对 TCP 相析出的影响,随着 Al 和 Cr 含量的增加, P 相倾向于转变为 $\alpha\text{-Mo}$ 相,并且,在 Al < 5% (质量分数,下同)且 Cr < 20% 时, Ni_3Al 基单晶合金 IC21 在热力学上无富 Mo 相析出。结合计算涂层中 Al 和 Cr 含量变化对界面行为的影响,表明涂

层中 Cr ≤ 20%, Al 在 8%~10% 之间时,涂层/合金界面组织稳定性良好。

界面组织演变对涂层/合金界面的性能具有重要的影响,高温合金中存在大量的 TCP 相是一个令人担忧的问题。合金中的难熔元素过饱和析出,形成了 TCP 相,难熔元素作为合金中的强化元素而言,其含量的下降会导致 γ 相固溶强化效果减弱^[57-59],同时会影响 γ 和 γ' 相的晶格错配度,使界面强化效果降低^[58]。在涂层下形成的 SRZ 减少了涂层的承载面积,并起到起裂点的作用,从而降低涂层的性能^[60]。

开展相场模拟可以获得涂层/合金界面的组织演变过程,有助于深入研究微观组织的演变机理。Wu 等^[61-62] 模拟了 Ni-Al-Cr 体系中 $\gamma + \beta$ 和 $\gamma + \gamma'$ 相的互扩散微观结构。Li 等^[63] 利用相场法模拟 Ni-Al-Cr 合金扩散偶中化学势的变化,阐明了一种新的 Al 上坡扩散现象,并讨论了温度梯度作用下无析出带的形成。通过构建 Ni-Al-Cr-Mo 四元相场模拟^[64],发现温度梯度加速了涂层与合金之间 Al 和 Cr 等元素的扩散,使得界面组织演变速度加快,此外,温度梯度造成涂层中 β 相数量减少,进一步加速了涂层-单晶合金的失效。然而,受限於相场模拟的组元数量,一般仅模拟 β 、 γ 和 γ' 三相的组织演变,而对于在涂层/合金界面处的其他析出相,例如 $\alpha\text{-Cr}$ 、TCP 相等对力学性能影响同样重要。未来若能进一步将外加载荷与温度的耦合作用引入相场动力学模型,则更能真实地模拟涂层-单晶合金体系应用于航空发动机涡轮叶片时的实际服役状态,所揭示的界面组织演变机理也有望为先进涂层设计提供更为有效的指导。

2.3 热防护涂层残余应力演变与失效机制

热障涂层是一种涂覆在高温合金表面的陶瓷涂层,主要起到隔绝合金基体与外界环境的作用,可大大提高航空发动机叶片的承温能力以及抗氧化、耐腐蚀性能。但热障涂层在服役过程中会发生高温氧化和材料成分的改变,同时涂层界面形貌、材料参数不匹配、温度梯度、陶瓷层高温蠕变等的交互作用,使涂层界面附近存在复杂的残余应力场。热障涂层的残余应力分布及演变是导致其产生失效、剥落的关键因素之一。因此,分析热障涂层的残余应力场分布状态及演变将为研究热障涂层失效机理提供理论依据。

为研究分析纳米热障涂层性能及失效机制等,采用大气等离子喷涂技术在 MCrAlY 表面制备具有良好高温热稳定性的纳米晶 $\text{Al}_2\text{O}_3\text{-YSZ}$ 热障涂

层。于庆河^[65]计算结果表明:对于纳米 4AIYSZ、8AIYSZ 和 13AIYSZ 涂层内 TGO 层与黏结层界面处的应力分布,无论是径向应力还是轴向应力,纳米 13AIYSZ 涂层明显小于纳米 4AIYSZ 和 8AIYSZ 涂。由于径向应力是造成涂层表面龟裂以及屈曲失稳的主要因素,同时轴向应力 S_y 是层间裂纹的成因。因此可推断,纳米 13AIYSZ 涂层具有最好的抗氧化性能和热循环寿命,这与热循环实验所得结论可相互印证。借助有限元分析三种不同掺杂量的纳米晶 Al_2O_3 -YSZ 热障涂层残余应力,采用瞬态分析法计算涂层从 1050 °C 经过 300 s 降温到 20 °C 时的热应力,比较陶瓷层成分为 4AIYSZ、8AIYSZ、13AIYSZ 时涂层应力值变化和分布。但该模型较为简单,在模拟精确度上仍有不足。张晨洁^[66]基于不同热障涂层组织形貌的精细化有限元计算研究,获得更为准确的制备态涂层残余应力分布情况。该研究建模重点是涂层层状形貌的模拟,不同于之前的工作仅仅把涂层分为简单的四层,而是尽力构建近真实情况下的热障涂层模型。该研究从应力角度阐明了 APS 热障涂层叶片在真实服役状态下 TGO 处发生开裂的成因与失效机理。根据计算得到的制备态 APS 涂层的应力分布情况分析得到,由于热力学性质差异大,热变形错配严重,TC/TGO 以及 TGO/BC 界面处存在应力集中现象,此处应力值大小为陶瓷层的 10 倍左右,并在后续增厚过程中此处应力呈现增大趋势,引起裂纹的萌生和扩展,导致陶瓷层和黏结层的分离,最后引起涂层的开裂和失效剥落。

与 APS 涂层制备不同,电子束物理气相沉积(EB-PVD)所制备的涂层形态为一系列垂直于基体合金表面竞争生长的柱状晶。含间隙的柱状晶形貌大大提高了热障涂层的应变耐受性,使 EB-PVD 热障涂层的抗脱落寿命比 APS 热障涂层提高不少。此方法的缺点在于柱状晶间隙会促进涂层氧化,且成本较高。由于航空发动机涡轮叶片的形状较为复杂,不同位置的基体曲率也有所不同,为了模拟叶片不同位置的 EB-PVD 热障涂层制备完成后的初始应力分布情况,黄金慧^[67]建立基体曲率不同的有限元模型来进行仿真计算,结果表明,在各不相同的基体曲率下,路径上的应力分布趋势一致,都是从陶瓷层顶端向内部逐渐缓慢增大,但是增加的幅度特别小;在接近陶瓷层与黏结层界面的区域,约距陶瓷层顶端 90 μm 的位置处开始,应力增加的幅度急剧增大,并在界面位置即距离陶瓷

层顶端 120 μm 的地方达到最大值;之后进入黏结层中,应力的大小又急剧下降,且在黏结层内部保持相对稳定的数值。对比不同曲率的应力分布情况,可得出:在陶瓷层表面,负曲率的凹界面涂层中制备拉应力最大,正曲率的凸界面涂层次之,曲率为 0 的平板状涂层内部拉应力最小。

3 机器学习助力新型单晶高温合金快速研发

3.1 单晶高温合金数据库与机器学习研究进展

3.1.1 单晶高温合金数据库

目前,限制材料设计的主要因素在于基础的材料“成分-工艺-组织-性能”关系不明确,即使借助材料多尺度计算模拟开展材料研究,也由于受到计算模拟效率与精度的限制,一些材料的关键现象、行为与机理仍然难以被精确预测和深入阐明,因而不足以指导材料的实际研发与应用。随着人工智能的发展,材料信息学不断完善,材料数据不断积累,基于数据驱动的研究策略为这一问题的解决提供了新的思路。数据驱动是指通过对大量数据的分析和处理,自动发现数据中的规律和特征,并将其编码成数学模型。与传统的理论推导方法不同,数据驱动方法不需要事先对系统进行深入的理论分析,而是直接从数据中获取信息,通过大量的计算和分析得出有效的预测结果。数据驱动方法为材料学研究提供了一种快速、高效、准确的方法,可以大大缩短研究周期,降低研究成本。发现蕴含于数据中的内在规律是数据驱动科学范式的核心,而基础数据的构成特点无疑决定了数据本身的内在价值及可应用价值。根据材料研究中重点关注的“成分-工艺-组织-性能”间关系,单晶高温合金数据的组成特点可以被总结为:(1)成分上组成多元复杂。典型的镍基高温合金包含 10 余种合金化元素。(2)工艺流程复杂,多变。合金与涂层材料的制备工艺通常由材料专家的经验决定,工艺数据组成的维度多变。(3)多样的微观组织结构。微观组织图像数据中难以被量化为材料学特征参数的结构、形态的信息仍以视觉图像形式存储。(4)用于衡量材料的性能标准多样化。复杂的服役环境要求高温合金兼具优异的力学性能与环境抗性,合金设计需考虑多个指标。因此,高温合金数据组成的显著特点是“多尺度,多维度,多目标”。考虑到单晶高温合金制造的高成本、长周期,过去研究对合金组成空间的探索仍是有限的,也造成了

“小数据集”与“迭代速度慢”的特点。

在过去的研发过程中,逐渐积累起了高温合金的成分-工艺-性能-组织的实验研究数据,并形成了系统的材料数据手册,涵盖合金成分,处理工艺,力学性能等;近年来,在数据驱动的研究新范式推动下,国内外也形成了一些成熟的数据库,例如,北京科技大学建立的 NMDMS 数据平台^[68],美国的 Mat Web 数据库与日本的 Mat Navi 数据库等。为进一步加速高温合金数据库的扩充,提出了高通量实验方法用以短时间内获取大批量成分/工艺-性能/组织实验数据。例如,对于单晶高温合金,使用变截面试样的高通量实验数据构建了时效条件与显微组织间的关系^[69],使用扩散偶试样的高通量实验数据构建了成分与析出相间的关系^[70-71]。理论计算数据可以帮助材料设计人员从更深层次的机理角度给出相应的指导,典型数据库有美国西北大学的 OQDM^[72]。值得一提的是,基于人工智能的自然语言处理技术与知识图谱概念的大语言模型的兴起^[73],为材料数据的快速获取提供了新的可能。文献信息挖掘方法能够实现对文本研究数据的快速处理、识别^[74-75],其中 Wang 等^[76]开发的数据抽取算法在 3 h 内从 14425 篇文章中提取了 2531 条具有成分和性质的记录,涵盖 γ 溶解温度、密度、固相线和液相线温度,该技术的进一步成熟化对于高温合金数据库的快速构建具有重要意义。

3.1.2 基于机器学习的材料研究简介

明确材料的成分-工艺-组织-性能关系是材料科学研究中的关键问题。通过实验、理论或计算进行的研究方法可被总结为科学研究的三种范式。传统上的材料研究通过理论、实验和计算进行新材料发现;数据驱动的材料科学研究中结合了数据与机器学习方法进行新材料发现。除了从实验现象进行的归纳分析,基于第一性原理,分子动力学,相场等模拟方法从微观角度给出指导,相图计算方法(CALPHAD)则被应用于计算平衡态下的物相组成及基本物理性质。但这些方法带来的指导是有限的,部分现象不能被解释与预测,材料的成分-工艺-组织-性能关系仍隐含于实验观测与模拟计算的大量数据中。

随着人工智能的发展,基于数据驱动的研究方法,即第四范式,为这一问题的解决提供了新的思路(图3)^[77]。机器学习是其中的核心方法,其可被定义为:利用数据或以往的经验,以此优化计算机程序的性能标准。图4(a)展示了使用机器学习建模的具体流程,包括数据处理、模型选择、特征工

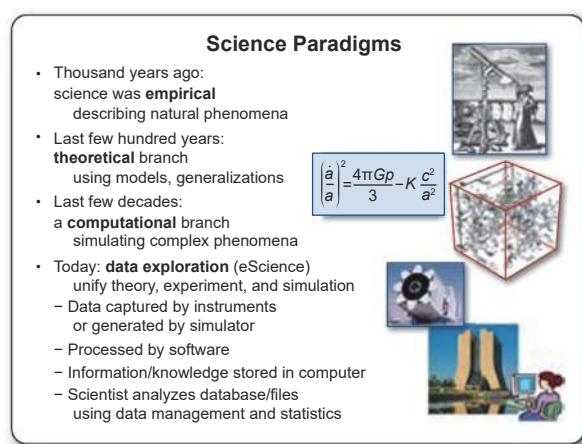


图3 科学发展的四种范式^[77]

Fig. 3 Four paradigms of scientific development^[77]

程、超参数选择、模型验证等步骤^[78]。图4(b)则展示了一些具体的机器学习算法^[79]。机器学习通常被用于学习数据与目标输出间关系,反映出隐藏于数据中的规律,其提供了一种建立物理量之间及物理量与目标性质之间内在关系的方法,因此可被应用到新材料设计甚至机理探索上。但小数据且高维的数据组成特点使得预测结果的不确定度大大增加,增加数据量是一个简单可行的办法,因而主动学习策略被提出以实现数据的加速标注与减小模型不确定度,主动学习方法如图4(c)所示^[80],其迭代链条为:“数据集-模型构建-材料设计-实验验证-数据反馈”,且效率已经被证明远超随机猜测。

3.2 基于机器学习的航发涡轮叶片用单晶合金蠕变性能预测与成分设计

蠕变行为引起的材料损伤是航空发动机关键热端部件主要的失效形式之一,因此提高蠕变断裂寿命是镍基单晶高温合金设计的核心目标,而准确、高效地预测蠕变寿命是关键难题。基于数据驱动的机器学习方法可辅助建立起单晶高温合金成分/工艺/微观组织与蠕变性能之间关系,这无疑提供了一种可解决上述问题,进而加速单晶高温合金的成分设计的有效方法。

影响高温合金蠕变寿命的主要因素,如成分、热处理工艺、组织和测试条件等通常被作为机器学习模型的输入,用以实现高温合金成分优化^[81]与性能预测^[82]。但单晶高温合金小数据集的特点,要求研究人员采用不同的策略提高该情况下机器学习模型的泛化性能。获取并使用合成数据是一种快速扩展训练数据量的方法。Zhang 等^[83]结合多种时间-温度参数模型,得到了蠕变断裂寿命、应力

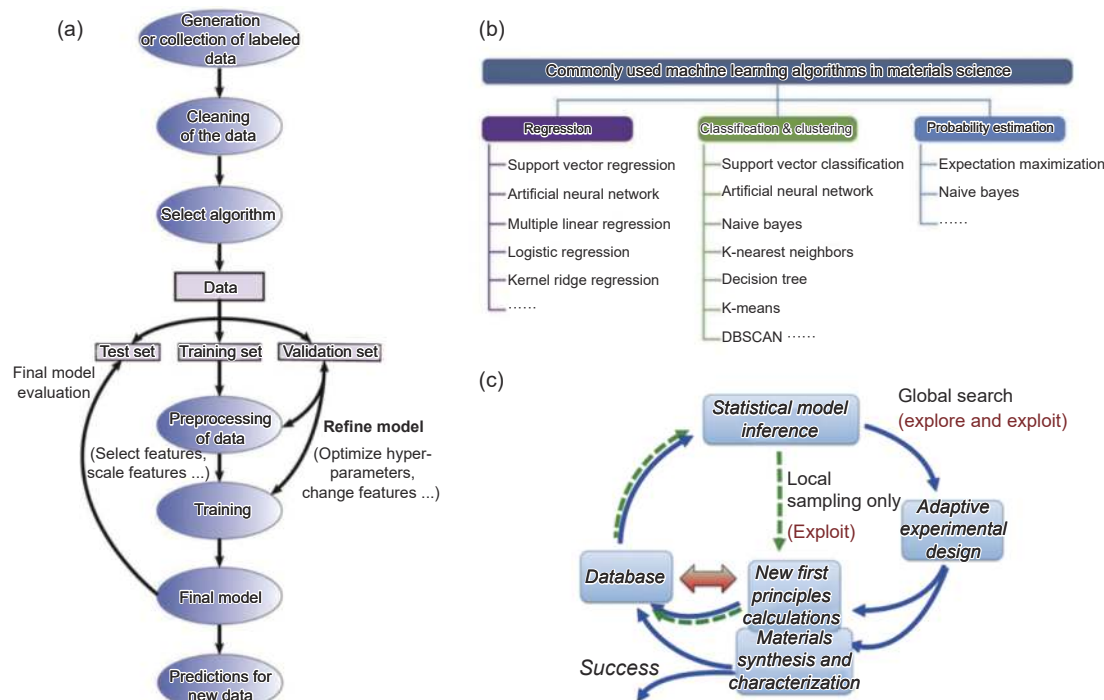


图 4 机器学习方法概述 (a) 机器学习中监督学习的基本工作流程^[78]; (b) 一些典型的机器学习算法, 包括监督学习的回归、分类算法, 无监督聚类算法以及概率估计算法^[79]; (c) 主动学习中数据集-模型构建-材料设计-实验验证-数据反馈的整体流程^[80]

Fig. 4 Overview of machine learning methods (a) basic workflow of supervised learning in machine learning^[78]; (b) some typical machine learning algorithms, including regression and classification algorithms for supervised learning, unsupervised clustering algorithms, and probabilistic estimation algorithms^[79]; (c) overall process of dataset-model construction-material design-experimental validation-feedback of data in active learning^[80]

和温度的参数方程并用以扩展训练集数据; Ma 等^[84]基于生成对抗网络获得了一批高质量的合成数据集, 并证明适当比例的合成数据可以显著提高蠕变寿命预测模型的精度和泛化能力。此外, Han 等^[85]开发了一种双模型链接方法, 用于提高小数据集上蠕变寿命的预测精度。

单晶高温合金数据库小样本特点加之“多尺度、多维度、多目标”的复杂性, 导致了模型对合金成分设计至关重要的可解释性与外推能力较弱, 限制了机器学习模型在成分设计中的应用。为解决这一问题, 研究人员将工作集中在细致的特征工程与材料描述符构建上。Zhao^[86]重点探讨了将相场方法与本构关系及机器学习相结合进行合金设计的思路。Huang 等^[87]结合物理冶金模型和相图计算方法(CALPHAD), 将 14 种成分特征降维, 得到 8 种微观组织特征用于预测蠕变寿命, 并使用 SHAP 分析解释了模型预测寿命与微观组织特征间的关系。Liu 等^[88]结合聚类算法与多种机器学习算法开发的 DCSA (divide-and-conquer self-adaptive) 模型同样引入了基于 CALPHAD 的微观结构参数用以描述蠕变行为。而 Yin 等^[89]通过特定领域

知识评估了热处理参数, 筛选了影响蠕变性能的关键特征, 用以构建物理约束下的支持向量回归模型。

深度学习模型具有强大的表示学习能力, 能够在数据中自动学习有效的特征表示, 是一种有效的替代特征工程的方法, 并且从深度学习表示中也可能获得可解释性信息。近年来, 在耐腐蚀合金^[90]、镁铝合金^[91]、钛合金^[92]、高熵合金^[93]等多组元合金的性能预测中表现出巨大潜力。目前已有研究将深度学习方法应用于高温合金领域^[19,94]。其中, Yang 等^[19]通过 Transformer 深度学习方法引入了元素交互信息表示学习模块作为先验物理约束, 构建了具有物理约束的单晶高温合金蠕变断裂寿命预测神经网络模型 (superalloy transformer-based network for creep, SaTNC), 模型表现出显著的泛化性能优势, 且其中的可解释性信息能够用于获取关键合金化元素交互作用及其对蠕变性能的综合影响等材料学见解。进一步地, 结合 SaTNC 模型与迁移学习建立了具有优异外推性能的单晶合金超高温蠕变断裂寿命预测模型, 并提出了一种单晶合金智能设计策略, 设计制备了一种新型单晶合金, 证明了该设计策略的有效性^[95]。

单晶高温合金微观结构的特征参数及形貌是成分设计中的一项关键性参考指标。建立准确性较经验模型与传统计算方法更高的机器学习模型,以实现晶格错配度、 γ' 相的热力学特征等微观结构特征参数的预测^[96-97]。

除了间接指导合金设计方向的研究,基于机器学习的微观结构参数预测模型也被直接应用于高温合金成分优化与蠕变性能预测。Liu等^[98]采用基于多元高斯分布概率密度函数的三目标优化算法,建立了优化Co-Ni-Al-Cr基高温合金的 γ' 体积分数、尺寸和形貌的主动学习流程,经过四次迭代筛选出了三种满足加工性能、环境耐性与蠕变强度需求的合金成分。Taylor等^[99-100]基于GPR算法实现了单晶高温合金 γ' 相分数与合金化元素两相分配行为的预测,其准确性优于CALPHAD;进而提出了一套元素未知的物理启发的描述符合用于预测蠕变寿命。Yang等^[101]采用集成特征工程策略与先验公式引导的分区自治线性策略的模型,构建了通过简单合金成分预测氧化速率常数 K_p ,进而预测 γ' 相分数、形状因子、尺寸等近表面显微组织演变特征的机器学习模型;并在此基础上构建了适用于薄壁单晶合金高温蠕变行为预测的本构模型,建立了单晶合金成分-近表面组织退化特征-薄壁单晶合金高温蠕变行为间的联系^[95]。

深度学习在计算机视觉领域的快速发展,使得合金微观结构图像可以直接作为输入而得到应用,为材料成分与微观组织之间或微观组织与性能间关系的建立提供了一种新的可能。近年来,基于深度学习的研究方法初步在高温合金领域得到了应用,例如,实现了对高温合金 γ/γ' 两相组织的识别分割^[102-103], γ' 相分数、平均尺寸和尺寸分布等微观结构参数的表征^[104],以及合金硬度的预测^[105]。

4 结语与展望

航空发动机部件正向着高温、高压比、高可靠性发展,对涡轮叶片材料提出更高的要求。“一代新材料,一代新型发动机”,在新一代航空发动机的牵引下,新一代单晶高温合金和热防护涂层的研制迫在眉睫。目前限制材料设计的主要因素在于基础材料的成分-工艺-组织-性能关系的不明确,即使借助材料多尺度计算模拟开展材料研究,也由于受到计算模拟效率与精度的限制,一些材料的关键现象、行为与机理仍然难以被精确预测和深入阐明,因而不足以指导材料的实际研发与应用。随着

人工智能的发展,材料信息学不断完善,材料数据不断积累,基于数据驱动的研究策略为这一问题的解决提供了新的思路。与传统的理论推导方法不同,数据驱动方法不需要先对系统进行深入的理论分析,而是直接从数据中获取信息,通过大量的计算和分析得出有效的预测结果。数据驱动方法为材料学研究提供了一种快速、高效、准确的方法,可以大大缩短研究周期,降低研究成本。这为新一代单晶合金和热防护涂层的发展和设计提供了新的可能性。

参考文献:

- [1] POLLOCK T M. Alloy design for aircraft engines[J]. *Nature Materials*, 2016, 15(8): 809-815.
- [2] YAO X, DING Q, WEI X, et al. The effects of key elements Re and Ru on the phase morphologies and microstructure in Ni-based single crystal superalloys[J]. *Journal of Alloys and Compounds*, 2022, 926: 166835.
- [3] 杜昆, 陈麒好, 孟宪龙, 等. 陶瓷基复合材料在航空发动机热端部件应用及热分析研究进展[J]. *推进技术*, 2022, 43(2): 113-131.
DU K, CHEN Q H, MENG X L, et al. Advancement in application and thermal analysis of ceramic matrix composites in aeroengine hot components[J]. *Journal of Propulsion Technology*, 2022, 43(2): 113-131.
- [4] 文生琼, 何爱杰. 陶瓷基复合材料在航空发动机热端部件上的应用[J]. *航空制造技术*, 2009(1): 4-7.
WEN S Q, HE A J. Application of CMC on thermal parts of aeroengine[J]. *Aeronautical Manufacturing Technology*, 2009(1): 4-7.
- [5] 宫声凯, 刘原, 耿粒伦, 等. 涂层/高温合金界面行为及调控研究进展[J]. *金属学报*, 2023, 59(9): 1097-1108.
GONG S K, LIU Y, GENG L L, et al. Advances in the regulation and interfacial behavior of coatings/superalloys[J]. *Acta Metallurgica Sinica*, 2023, 59(9): 1097-1108.
- [6] XIA W, ZHAO X, YUE L, et al. A review of composition evolution in Ni-based single crystal superalloys[J]. *Journal of Materials Science & Technology*, 2020, 44: 76-95.
- [7] WU R, ZHAO Y, YIN Q, et al. Atomistic simulation studies of Ni-based superalloys[J]. *Journal of Alloys and Compounds*, 2021, 855: 157355.
- [8] DAROLIA R. Development of strong, oxidation and corrosion resistant nickel-based superalloys: critical review of challenges, progress and prospects[J]. *Inter-*

- national Materials Reviews, 2019, 64(6): 355-380.
- [9] LONG H, MAO S, LIU Y, et al. Microstructural and compositional design of Ni-based single crystalline superalloys — a review[J]. *Journal of Alloys and Compounds*, 2018, 743: 203-220.
- [10] WEI L, PENG H, JIA F, et al. Cyclic oxidation behavior of Hf/Zr Co-doped EB-PVD β -NiAl coatings at 1200 °C[J]. *Surface and Coatings Technology*, 2015, 276: 721-725.
- [11] HE J, ZHANG Z, PENG H, et al. The role of Dy and Hf doping on oxidation behavior of two-phase ($\gamma' + \beta$) Ni-Al alloys[J]. *Corrosion Science*, 2015, 98: 699-707.
- [12] PAPADIMITRIOU I, GIALAMPOUKIDIS I, VROCHIDIS S, et al. AI methods in materials design, discovery and manufacturing: a review[J]. *Computational Materials Science*, 2024, 235: 112793.
- [13] DING Q, LI S, CHEN L Q, et al. Re segregation at interfacial dislocation network in a nickel-based superalloy[J]. *Acta Materialia*, 2018, 154: 137-146.
- [14] MOHLES V. Computer simulations of particle strengthening: the effects of dislocation dissociation on lattice mismatch strengthening[J]. *Materials Science and Engineering: A*, 2001, 319/321: 206-210.
- [15] LU B, WANG CY, DU Z. Site preferences of alloying transition metal elements in Ni-based superalloy: a first-principles study[J]. *Chinese Physics B*, 2018, 27(9): 097102.
- [16] HU P, ZHAO W Y, RU Y, et al. Unveiling the synergistic effects of Re-Mo alloying on diffusion behaviors in γ -Ni: from a theoretical perspective[J]. *Journal of Materials Research and Technology*, 2023, 23: 1214-1224.
- [17] GONG W, ZHAO W Y, MIAO N, et al. Strengthening effects of alloying elements W and Re on Ni_3Al : a first-principles study[J]. *Computational Materials Science*, 2018, 144: 23-31.
- [18] HAO L, GUO J, LEI X, et al. Co-alloying effects on the site preference and the elastic properties of γ' - Ni_3Al from first-principles calculations[J]. *Journal of Applied Physics*, 2020, 128(18): 185105.
- [19] YANG F, ZHAO W Y, RU Y, et al. Deep learning accelerates the development of Ni-based single crystal superalloys: a physical-constrained neural network for creep rupture life prediction[J]. *Materials & Design*, 2023, 232: 112174.
- [20] ZHAO W Y, SUN Z M, GONG S K. Vacancy mediated alloying strengthening effects on γ/γ' interface of Ni-based single crystal superalloys: a first-principles study[J]. *Acta Materialia*, 2017, 135: 25-34.
- [21] LI C, HU P, RU Y, et al. The strengthening effects of Re- X ($X=\text{Mo, W, Cr Ta, Re}$) mediated by their local partitioning behaviors at γ/γ' interface in Ni-based single crystal superalloys[J]. *Journal of Alloys and Compounds*, 2022, 923: 166367.
- [22] CHEN L Q, ZHAO Y. From classical thermodynamics to phase-field method[J]. *Progress in Materials Science*, 2022, 124: 100868.
- [23] ZHAO Y. Stability of phase boundary between L_{12} - Ni_3Al phases: a phase field study[J]. *Intermetallics*, 2022, 144: 107528.
- [24] YANG H, ZHU L, ZHANG R, et al. Influence of high stacking-fault energy on the dissociation mechanisms of misfit dislocations at semi-coherent interfaces[J]. *International Journal of Plasticity*, 2020, 126: 102610.
- [25] ZHAO W, LI W, LI X, et al. Thermo-mechanical properties of Ni-Mo solid solutions: a first-principles study[J]. *Computational Materials Science*, 2019, 158: 140-148.
- [26] HU P, ZHAO W, SUN Z. Vacancy effect on the generalized stacking fault energy of alloyed γ -Ni system: a first-principles study[J]. *Computational Materials Science*, 2019, 166: 187-192.
- [27] HU P, ZHAO W, RU Y, et al. Effects of intrinsic point defects on antiphase boundary energy of γ' - Ni_3Al from first-principles calculations[J]. *Journal of Materials Science*, 2022, 57(27): 12916-12928.
- [28] DODARAN M, ETTEFAGH A H, GUO S M, et al. Effect of alloying elements on the γ' antiphase boundary energy in Ni-base superalloys[J]. *Intermetallics*, 2020, 117: 106670.
- [29] ZHANG J X, WANG J C, HARADA H, et al. The effect of lattice misfit on the dislocation motion in superalloys during high-temperature low-stress creep[J]. *Acta Materialia*, 2005, 53(17): 4623-4633.
- [30] LI Y L, WU W P, RUAN Z G. Molecular dynamics simulation of the evolution of interfacial dislocation network and stress distribution of a Ni-based single-crystal superalloy[J]. *Acta Metallurgica Sinica*, 2016, 29(7): 689-696.
- [31] MISHIN Y. Atomistic modeling of the γ and γ' -phases of the Ni-Al system[J]. *Acta Materialia*, 2004, 52(6): 1451-1467.
- [32] DU J P, WANG C Y, YU T. Construction and application of multi-element EAM potential (Ni-Al-Re) in γ/γ' Ni-based single crystal superalloys[J]. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 2013, 21(1): 015007.

- [33] PURJA PUN G P, YAMAKOV V, MISHIN Y. Interatomic potential for the ternary Ni-Al-Co system and application to atomistic modeling of the B2-L1₀ martensitic transformation[J]. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 2015, 23(6): 065006.
- [34] MISHIN Y. Machine-learning interatomic potentials for materials science[J]. *Acta Materialia*, 2021, 214: 116980.
- [35] WANG H, ZHANG L, HAN J, et al. DeePMD-kit: a deep learning package for many-body potential energy representation and molecular dynamics[J]. *Computer Physics Communications*, 2018, 228: 178-184.
- [36] LONG M, LERICHE N, NIANE N T, et al. A new experimental and simulation methodology for prediction of recrystallization in Ni-based single crystal superalloys during investment casting[J]. *Journal of Materials Processing Technology*, 2022, 306: 117624.
- [37] WANG Q, HU B, ZHAO H, et al. Evolution of static recrystallization microstructure caused by residual strain of an Al-rich Ni-based single crystal superalloy[J]. *Materials Science and Engineering: A*, 2024, 894: 146188.
- [38] SHANG Y, ZHANG H, HOU H, et al. High temperature tensile behavior of a thin-walled Ni based single-crystal superalloy with cooling hole: *in-situ* experiment and finite element calculation[J]. *Journal of Alloys and Compounds*, 2018, 782: 619-631.
- [39] HU C, ZHANG Z, CHEN H, et al. Reactive elements dependence of elastic properties and stacking fault energies of γ -Ni, γ' -Ni₃Al and β -NiAl[J]. *Journal of Alloys and Compounds*, 2020, 843: 155799.
- [40] ZHANG Z, HU C C, CHEN H, et al. Pinning effect of reactive elements on structural stability and adhesive strength of environmental sulfur segregation on Al₂O₃/NiAl interface[J]. *Scripta Materialia*, 2020, 188: 174-178.
- [41] ZHANG Z, HU C C, CHEN H, et al. Effects of reactive elements and Pt doping on the adhesive strength and tension property of α -Al₂O₃/ γ' -Ni₃Al-S interface[J]. *Materials Today Communications*, 2023, 37: 107248.
- [42] ROY I, RAY P K, BALASUBRAMANIAN G. Examining oxidation in β -NiAl and β -NiAl+Hf alloys by stochastic cellular automata simulations[J]. *npj Materials Degradation*, 2021, 5(1): 55.
- [43] ESAKKIRAJA N, GUPTA A, JAYARAM V, et al. Diffusion, defects and understanding the growth of a multi-component interdiffusion zone between Pt-modified B2 NiAl bond coat and single crystal superalloy[J]. *Acta Materialia*, 2020, 195: 35-49.
- [44] DAHL K V, HALD J, HORSEWELL A. Interdiffusion between Ni-based superalloy and MCrAlY coating[J]. *Defect and Diffusion Forum*, 2006, 258-260: 73-78.
- [45] YANG L, CHEN M, WANG J, et al. Microstructure and composition evolution of a single-crystal superalloy caused by elements interdiffusion with an overlay NiCrAlY coating on oxidation[J]. *Journal of Materials Science and Technology*, 2020, 45: 49-58.
- [46] MORA GARCÍA A G, Mosbacher M, HASTREITER J, et al. Creep behavior of polycrystalline and single crystal Ni-based superalloys coated with Ta-containing NiCoCrAlY by high-velocity oxy-fuel spraying[J]. *Scripta Materialia*, 2020, 178: 522-526.
- [47] MABRU C, STEPHAN N, CHIERAGATTI R. Influence of coating on the thermal fatigue resistance of a Ni-based superalloy[J]. *International Journal of Damage Mechanics*, 2016, 15(4): 375-391.
- [48] LIU Y, RU Y, ZHANG H, et al. Coating-assisted deterioration mechanism of creep resistance at a nickel-based single-crystal superalloy[J]. *Surface and Coatings Technology*, 2021, 406: 126668.
- [49] ONSAGER L. Theories and problems of liquid diffusion[J]. *Annals of the New York Academy of Sciences*, 1945, 46(5): 241-265.
- [50] LARSSON H, ENGSTRÖM A. A homogenization approach to diffusion simulations applied to $\alpha+\gamma$ Fe-Cr-Ni diffusion couples[J]. *Acta Materialia*, 2006, 54(9): 2431-2439.
- [51] YUAN K, PENG R L, LI X H. A continuous β -NiAl layer forming at the interface of a MCrAlY and CMSX-4[J]. *Journal of Thermal Spray Technology*, 2015, 25(1/2): 244-251.
- [52] YUAN K, ERIKSSON R, PENG R L, et al. MCrAlY coating design based on oxidation-diffusion modelling part I: microstructural evolution[J]. *Surface and Coatings Technology*, 2014, 254: 79-96.
- [53] YUAN K, ERIKSSON R, PENG R L, et al. Modeling of microstructural evolution and lifetime prediction of MCrAlY coatings on nickel based superalloys during high temperature oxidation[J]. *Surface and Coatings Technology*, 2013, 232: 204-215.
- [54] FORSLUND A, LARSSON H. Simulation of reaction-diffusion between substrate and coating during vapor deposition processes[J]. *Calphad-Computer Coupling of Phase Diagrams and Thermochemistry*, 2019, 64: 278-283.

- [55] PILLAI R, SLOOF W G, CHYRKIN A, et al. A new computational approach for modelling the microstructural evolution and residual lifetime assessment of MCrAlY coatings[J]. *Materials at High Temperatures*, 2015, 32(1/2): 57-67.
- [56] GENG L, ZHAO W, RU Y, et al. Tailoring coating composition for the associated microstructural stability of a single-crystal superalloy: an experimental and simulation study[J]. 2023, 211: 110916.
- [57] RAE C M F, REED R C. The precipitation of topologically close-packed phases in rhenium-containing superalloys[J]. *Acta Materialia*, 2001, 49(19): 4113-4125.
- [58] SIMONETTI M, CARON P. Role and behaviour of μ phase during deformation of a nickel-based single crystal superalloy[J]. *Materials Science and Engineering: A*, 1998, 254(1): 1-12.
- [59] CHEN Q Z, JONES C N, KNOWLES D M. Effect of alloying chemistry on MC carbide morphology in modified RR2072 and RR2086 SX superalloys[J]. *Scripta Materialia*, 2002, 47(10): 669-675.
- [60] WALSTON W S, SCHAEFFER J C, MURPHY W H. A new type of microstructural instability in superalloys-SRZ[C]//*Superalloys 1996*. Pennsylvania: TMS, 1996: 9-18.
- [61] WU K, CHANG Y, WANG Y. Simulating interdiffusion microstructures in Ni-Al-Cr diffusion couples: a phase field approach coupled with CALPHAD database[J]. *Scripta Materialia*, 2004, 50: 1145-1150.
- [62] WU K, ZHOU N, PAN X, et al. Multiphase Ni-Cr-Al diffusion couples: a comparison of phase field simulations with experimental data[J]. *Acta Materialia*, 2008, 56(15): 3854-3861.
- [63] LI Y, WANG H, CHEN J, et al. Temperature gradient driving interdiffusion interface and composition evolution in Ni-Al-Cr alloys[J]. *Rare Metals*, 2022, 41(9): 3186-3196.
- [64] 耿粒伦. 基于热/动力学计算的 IC21 单晶合金抗氧化涂层设计研究 [D]. 北京: 北京航空航天大学, 2024.
- GENG L L. Design of oxidation resistant coatings for IC21 single crystal superalloy based on thermodynamic/kinetic calculations[D]. Beijing: Beihang University, 2024.
- [65] 于庆河. 等离子喷涂制备纳米 Al_2O_3 -YSZ 涂层及其热物理性能研究 [D]. 北京: 北京航空航天大学, 2011.
- YU Q H. Thermalphysical properties of nanostructured Al_2O_3 -YSZ coatings produced by atmospheric plasma spraying. [D]. Beijing: Beihang University, 2011.
- [66] 张晨洁. 基于有限元精细建模的热障涂层应力分布研究 [D]. 北京: 北京航空航天大学, 2023.
- ZHANG C J. Stress distribution of thermal barrier coatings based on finite element fine modeling[D]. Beijing: Beihang University, 2023.
- [67] 黄金慧. 基体曲率与涂层厚度对 EB-PVD 热障涂层内应力演变机制的数值模拟研究 [D]. 北京: 北京航空航天大学, 2022.
- HUANG J H. Numerical simulation of substrate curvature and coating thickness on internal stress evolution mechanism of EB PVD thermal barrier coatings[D]. Beijing: Beihang University, 2022.
- [68] GONG H, HE J, ZHANG X, et al. A repository for the publication and sharing of heterogeneous materials data[J]. *Scientific Data*, 2022, 9(1): 787.
- [69] GORGANNEJAD S, REISI GAHROOEI M, PAYN-ABAR K, et al. Quantitative prediction of the aged state of Ni-base superalloys using PCA and tensor regression[J]. *Acta Materialia*, 2019, 165: 259-269.
- [70] WANG Y, LU M, WANG Z, et al. The learning of the precipitates morphological parameters from the composition of nickel-based superalloys[J]. *Materials & Design*, 2021, 206: 109747.
- [71] QIN Z, WANG Z, WANG Y, et al. Phase prediction of Ni-base superalloys via high-throughput experiments and machine learning[J]. *Materials Research Letters*, 2020, 9(1): 32-40.
- [72] SAAL J E, KIRKLIN S, AYKOL M, et al. Materials design and discovery with high-throughput density functional theory: the open quantum materials database (OQMD)[J]. *JOM*, 2013, 65(11): 1501-1509.
- [73] MIN B, ROSS H, SULEM E, et al. Recent advances in natural language processing via large pre-trained language models: a survey[J]. *ACM Computing Surveys*, 2023, 56(2): 1-40.
- [74] PEI Z, YIN J, LIAW P K, et al. Toward the design of ultrahigh-entropy alloys via mining six million texts[J]. *Nature Communications*, 2023, 14(1): 54.
- [75] COURT C J, COLE J M. Magnetic and superconducting phase diagrams and transition temperatures predicted using text mining and machine learning[J]. *npj Computational Materials*, 2020, 6(1): 18.
- [76] WANG W, JIANG X, TIAN S, et al. Automated pipeline for superalloy data by text mining[J]. *npj Computational Materials*, 2022, 8(1): 9.
- [77] HEY T, TANSLEY S, TOLLE K, et al. The fourth paradigm: data-intensive scientific discovery [C]//*E-science and information management. Third International Symposium on Information Management in a Changing*

- World. Berlin: Springer, 2012.
- [78] SCHMIDT J, MARQUES M R G, BOTTI S, et al. Recent advances and applications of machine learning in solid-state materials science[J]. *npj Computational Materials*, 2019, 5(1): 83.
- [79] LIU Y, ZHAO T, JU W, et al. Materials discovery and design using machine learning[J]. *Journal of Materials*, 2017, 3(3): 159-77.
- [80] LOOKMAN T, BALACHANDRAN P V, XUE D, et al. Active learning in materials science with emphasis on adaptive sampling using uncertainties for targeted design[J]. *npj Computational Materials*, 2019, 5(1): 21.
- [81] GAO J, TONG Y, ZHANG H, et al. Machine learning assisted design of Ni-based superalloys with excellent high-temperature performance[J]. *Materials Characterization*, 2023, 198: 112740.
- [82] ZHU Y, DUAN F, YONG W, et al. Creep rupture life prediction of nickel-based superalloys based on data fusion[J]. *Computational Materials Science*, 2022, 211: 118226.
- [83] ZHANG X, YAO J, WU Y, et al. A method for predicting the creep rupture life of small-sample materials based on parametric models and machine learning models[J]. *Materials*, 2023, 16(20): 6804.
- [84] MA C, TANG Y, BAO G. Machine learning-based prediction and generation model for creep rupture time of nickel-based alloys[J]. *Computational Materials Science*, 2024, 233: 112736.
- [85] HAN H Y, LI W D, ANTONOV S, et al. Mapping the creep life of nickel-based SX superalloys in a large compositional space by a two-model linkage machine learning method[J]. *Computational Materials Science*, 2022, 205: 111229.
- [86] ZHAO Y. Understanding and design of metallic alloys guided by phase-field simulations[J]. *npj Computational Materials*, 2023, 9(1): 94.
- [87] HUANG Y, LIU J, ZHU C, et al. An explainable machine learning model for superalloys creep life prediction coupling with physical metallurgy models and CALPHAD[J]. *Computational Materials Science*, 2023, 227: 112283.
- [88] LIU Y, WU J, WANG Z, et al. Predicting creep rupture life of Ni-based single crystal superalloys using divide-and-conquer approach based machine learning[J]. *Acta Materialia*, 2020, 195: 454-467.
- [89] YIN J, RAO Z, WU D, et al. Interpretable predicting creep rupture life of superalloys: enhanced by domain-specific knowledge[J]. *Advanced Science*, 2024, 11(11): 2307982.
- [90] SASIDHAR K N, SIBONI N H, MIANROODI J R, et al. Enhancing corrosion-resistant alloy design through natural language processing and deep learning[J]. *Science Advances*, 2023, 9(32): eadg7992.
- [91] MOKHTARI M A, NIKZAD M H, JALALVAND M. Competition of systematically optimized deep neural networks for the estimation of tensile behavior of aluminum-magnesium alloy[J]. *Physica Scripta*, 2024, 99(6): 066006.
- [92] ZHU S, ZHANG Y, ZHU B, et al. High cycle fatigue life prediction of titanium alloys based on a novel deep learning approach[J]. *International Journal of Fatigue*, 2024, 182: 108206.
- [93] FENG S, FU H, ZHOU H, et al. A general and transferable deep learning framework for predicting phase formation in materials[J]. *npj Computational Materials*, 2021, 7(1): 10.
- [94] WEN H, WANG S, JIN J, et al. Deep learning-based modeling of the strain rate-dependent thermomechanical processing response for a novel HIPed P/M nickel-based superalloy[J]. *Journal of Materials Processing Technology*, 2024, 324: 118126.
- [95] 杨帆. 基于机器学习的航发涡轮叶片用单晶合金关键性能预测与成分设计 [D]. 北京: 北京航空航天大学, 2024.
- YANG F. Prediction of key properties and composition design of single crystal superalloys for aero-engine turbine blades based on machine learning[D]. Beijing: Beihang University, 2024.
- [96] JIANG X, YIN H Q, ZHANG C, et al. An materials informatics approach to Ni-based single crystal superalloys lattice misfit prediction[J]. *Computational Materials Science*, 2018, 143: 295-300.
- [97] ZHANG Y, XU X. Lattice misfit predictions via the gaussian process regression for Ni-Based single crystal superalloys[J]. *Metals and Materials International*, 2020, 27(2): 235-53.
- [98] LIU P, HUANG H, WEN C, et al. The γ/γ' microstructure in CoNiAlCr-based superalloys using triple-objective optimization[J]. *npj Computational Materials*, 2023, 9(1): 140.
- [99] TAYLOR P L, CONDUIT G. Machine learning predictions of superalloy microstructure[J]. *Computational Materials Science*, 2022, 201: 110916.
- [100] TAYLOR P L, CONDUIT G. Machine learning superalloy microchemistry and creep strength from physical descriptors[J]. *Computational Materials Science*, 2023,

- 227: 112265.
- [101] YANG F, ZHAO W, RU Y, et al. Predicting the oxidation kinetic rate and near-surface microstructural evolution of alumina-forming Ni-based single crystal superalloy based on machine learning[J]. *Acta Materialia*, 2024, 266: 119703.
- [102] YANG C, YOU X, YU R, et al. Semi-supervised deep transfer learning for the microstructure recognition in the high-throughput characterization of nickel-based superalloys[J]. *Materials Characterization*, 2023, 203: 113094.
- [103] XU J, LI L, LIU X, et al. Fast characterization framework for creep microstructure of a nickel-based SX superalloy with high-throughput experiments and deep learning methods[J]. *Materials Characterization*, 2022, 187: 111857.
- [104] QIN Z, LI W, WANG Z, et al. High-throughput characterization methods for Ni-based superalloys and phase prediction via deep learning[J]. *Journal of Materials Research and Technology*, 2022, 21: 1984-1997.
- [105] WANG C, SHI D, LI S. A study on establishing a microstructure-related hardness model with precipitate segmentation using deep learning method[J]. *Materials (Basel)*, 2020, 13(5): 1256.

收稿日期: 2024-07-07; 修订日期: 2024-08-05

基金项目: 国家自然科学基金(92360302)

通讯作者: 赵文月(1984—), 女, 博士, 副研究员, 研究方向为高温结构材料服役行为与机理, 联系地址: 北京市海淀区学院路37号北京航空航天大学(100191), E-mail: wendyzhao56@buaa.edu.cn

(本文责编: 徐永祥)