

# 基于人工神经网络的镍基单晶高温合金蠕变寿命预测模型及应用

李春雨<sup>1, 2</sup>, 刘纪德<sup>2</sup>, 张文颖<sup>1, 2</sup>, 王家健<sup>2</sup>, 朱崇伟<sup>2</sup>, 李金国<sup>2</sup>

(1. 东北大学材料科学与工程学院, 辽宁沈阳 110004; 2. 中国科学院金属研究所, 辽宁沈阳 110000)

**摘要:** 镍基单晶高温合金因其优越的高温强度, 被广泛应用于航空发动机热端部件, 蠕变寿命是衡量单晶高温合金性能的重要指标。本研究通过建立ANN机器学习模型, 实现高温合金蠕变寿命预测, 通过在模型内添加合金显微组织参数提高模型精度, 降低模型过拟合倾向, 提高模型泛化能力。将模型应用于DD4500合金优化, 逆向指导合金成分设计, 新设计合金较原合金蠕变寿命得到大幅提升, 同时印证了机器学习技术应用于材料科学领域的有效性。

**关键词:** 镍基单晶高温合金; 蠕变寿命预测; 机器学习; ANN模型

航空发动机被誉为工业皇冠上的明珠, 高温合金是发展高性能航空发动机不可或缺的材料<sup>[1-2]</sup>。高温合金的蠕变寿命是评价其性能的重要指标, 单晶高温合金通过消除晶界, 减少了晶界强化相的溶解和晶界氧化, 有效提高了材料的高温力学性能和抗氧化性能, 其优异的高温强度、抗氧化性和抗蠕变性能, 使得合金能够在高温高压环境下长时间稳定工作。目前, 镍基单晶高温合金广泛应用于航空发动机的热端部件, 例如涡轮叶片、导向叶片和燃烧室等, 是现代高性能航空发动机的关键材料<sup>[3-6]</sup>。

传统高温合金成分的设计主要依赖“试错法”, 合金设计通常需要经过多轮试验验证, 包括合金熔炼、热处理、微观结构分析和性能测试等多个环节, 不同成分和工艺参数组合对合金性能的影响复杂多变, 难以预测, 导致试验失败率高, 延长了研发周期<sup>[7-8]</sup>。每个试验周期都需要等待材料制备和性能测试等环节的结果, 尤其是一些耗时的测试项目, 如高温持久性能测试, 进一步拖长了研发周期。高温合金材料和制备工艺相对复杂, 需要使用昂贵的原材料和设备, 例如高纯度金属和真空感应熔炼炉等, 导致试验成本居高不下。高温合金设计需要投入大量的人力资源进行试验设计和数据分析, 大量失败的试验不仅浪费时间和资源, 还会造成环境污染和安全隐患, 进一步推高了研发成本。传统高温合金设计依赖于材料科学家和工程师的经验积累, 不同的研究人员可能基于不同的经验做出不同的判断, 导致设计方案的差异, 难以保证设计方案的普适性和可重复性。传统方法缺乏系统的理论指导, 难以解释试验现象背后的物理机制, 限制了合金设计理论的发展<sup>[9-10]</sup>。

总之, 传统的“试错法”在高温合金设计中存在试验周期长、成本高和依赖经验等弊端, 限制了新材料的研发效率和性能突破。数据驱动方法利用大数据和机器学习技术分析现有试验数据, 构建材料性能预测模型, 减少对试验的依赖, 缩短研发周期和成本, 有效克服传统方法的局限性, 推动高温合金设计向数字化、智能化和高效化的方向发展<sup>[11-14]</sup>。目前, 机器学习技术已应用在材料预测的多个方面, 辅助新材料的开发<sup>[15]</sup>。Zou等使用 diffusion-multiple 方法收集大量数据, 建立合金成分与重要热力学和微观结构参数(如相组成、 $\gamma'$ 相分数和 $\gamma'$ 相溶解温度)之间关系的模型, 预测 $\gamma'$ 相体积分数的GBDT模型 $R^2$ 为0.954, 通过模型设计出一种新型九元Co基高温合金<sup>[16]</sup>。Yu等利用400余组试验数据样本, 以成分和热处理制度等23个材料参数为特征, 采用随机森林分类模型对具有 $\gamma'$ 相的候选物进行识别, 对候选样本

## 作者简介:

李春雨(2000-), 男, 硕士生, 研究方向为机器学习向单晶高温合金设计。E-mail: 1666784495@qq.com

## 通信作者:

李金国, 男, 研究员。E-mail: jgli@imr.ac.cn;  
刘纪德, 男, 正高级工程师。E-mail: jdliu@imr.ac.cn

中图分类号: TG132.3+2

文献标识码: A

文章编号: 1001-4977(2025)

07-0905-10

## 收稿日期:

2025-01-07 收到初稿,  
2025-02-20 收到修订稿。

进行随机森林回归模型, 预测候选样本的  $\gamma'$  相溶解温度, 通过模型设计出了一种高  $\gamma'$  相溶解温度的四元Co基高温合金<sup>[17]</sup>。Fu等通过对DZ125进行大量的温度-应力-时间耦合试验, 得到了不同程度的显微组织演化, 并通过选取的显微组织描述符和所得显微组织进行了量化得到模型数据集, 提出了一种基于反向传播人工神经网络 (BPANN) 的涡轮叶片服役状态评估方法, 建立了叶片微观组织演变与温度、应力和时间的定量关联关系, 以服役900 h的DZ125涡轮叶片为例, 对模型的应用进行了验证<sup>[18]</sup>。Jiang等通过文献积累100余条数据样本构建Ni基单晶高温合金数据集, 以合金成分、枝晶、试样形状、尺寸及温度为特征, 建立多层感知器 (MLP) 晶格失配模型, 模型预测精度优于传统经验公式<sup>[19]</sup>。Wang等建立了一个包含广泛成分和RAFM钢处理工艺的数据库, 以屈服强度和伸长率作为输出, 建立随机森林回归模型, 并依据模型预测结果, 建立了RAFM钢强度与塑性平衡的工艺窗口 (回火温度750~760 °C, 回火时间30~120 min, Cr含量8wt%~9wt%等)<sup>[20]</sup>。Guo等通过6万余个钢的工业数据样本建立数据集, 以工艺参数和化学成分等27条材料参数为输入, 屈服强度、抗拉强度和伸长率三种性能为输出建立随机森林回归模型, 进行多性能优化, 利用该模型对不同合金含量下的三种性能的可能边界进行了评估<sup>[21]</sup>。结果反映了三种性能随合金含量的变化趋势, 与工程经验和材料知识基本一致。Liu等对266个合金样品的合金成分、测试温度、测试应力和热处理工艺等特征进行表征, 构建了高质量蠕变数据集, 进行分类后以5种回归算法进行蠕变寿命预测建立模型, 最优模型 $R^2$ 达0.917<sup>[22]</sup>。Hu等以500余条包含合金成分、 $\gamma'$ 相体积分数和蠕变寿命等特征的数据构建数据集, 结合遗传算法对人工神经网络模型进行优化, 模型预测精度超90%, 并利用该模型设计了一种高屈服强度和高蠕变寿命的新合金<sup>[23]</sup>。可见, 以机器学习为主的数据驱动方法已广泛应用在材料的组织结构预测、性能预测和服役行为预测等多个方面, 加速材料的开发和利用。

人工神经网络 (Artificial Neural Network, ANN) 作为一种代表性的机器学习方法, 在材料设计领域展现出强大的潜力和优势, 主要体现在以下几个方面<sup>[24-26]</sup>。

(1) 处理复杂数据关系的能力。材料性能往往受到多种复杂因素的共同影响, 这些因素之间可能存在非线性关系。ANN 能够通过多层网络结构学习和表示这些复杂的非线性映射关系, 从而更准确地预测材料性能。材料设计需要考虑多种成分、工艺参数和微观结构等因素, 这些因素构成了高维输入空间。ANN 可以有效处理高维数据, 并从中挖掘出对材料性能影响最大的关键特征。

(2) 高效的学习和预测能力。ANN 可以利用GPU进行并行计算, 高效地训练模型并进行预测, 大大缩短了材料设计和优化的时间周期。ANN 能够根据新的数据不断更新和优化模型, 适应材料设计领域的快速发展和新知识的不断涌现。预训练的 ANN 模型可以迁移到相似的材料设计任务中, 利用已有知识快速学习和适应新任务, 减少训练数据量和计算成本。

(3) 降低试验成本和风险。ANN可以模拟和预测大量材料组合的性能, 代替传统的试验筛选方法, 大幅降低试验成本和周期, 同时减少对环境和资源的消耗。ANN 可以根据预测结果指导试验方案设计, 优化试验参数, 提高试验效率和成功率。

因此, 本文拟通过利用人工神经网络 (ANN) 构建一个高效精准的单晶高温合金蠕变寿命预测模型, 以此来逆向指导合金成分的设计, 从而加速合金研发进程并显著节约时间和经济成本。首先, 研究将通过 Thermo-Calc 软件进行大规模的热力学计算, 以此来补充和丰富数据集, 确保模型的训练数据具有足够的多样性和代表性。随后, 基于这些数据, 利用ANN模型来建立单晶高温合金的蠕变寿命预测模型。这一模型不仅需要具备高精度的预测能力, 还需在保证预测准确性的同时, 提供对模型预测结果的深入解释。为此, 计划采用SHAP (Shapley Additive Explanations) 方法对ANN模型进行可解释性分析。SHAP方法能够量化各个描述符 (即合金成分的各项特征) 对合金蠕变寿命的贡献, 从而能够理解哪些成分或特征是影响蠕变寿命的关键因素。这一分析不仅有助于验证模型的合理性, 还能为合金成分的优化提供直观的指导。在模型建立完成后, 将它应用于实际的合金成分设计中, 具体来说, 是对DD4500合金的成分进行优化设计, 以期通过优化成分配比来提高其蠕变寿命。这一过程不仅验证了模型的实用性和准确性, 也为高温合金的开发提供了新的技术路径和策略。总之, 本研究通过结合先进的热力学计算和机器学习技术, 旨在建立一个既高效又可解释的蠕变寿命预测模型, 并通过这一模型逆向指导合金成分设计, 最终实现高温合金性能的提升和研发的加速。

## 1 ANN模型建立

### 1.1 数据集建立

进行高温合金蠕变试验成本高, 周期长, 进行大批量蠕变试验以获取数据集是不现实的, 因此, 本研究从公开论文及专利收集了400余组高温合金蠕变寿命数据<sup>[22, 27-34]</sup>, 数据覆盖一代至四代单晶高温合金, 构建起模型建立所需的数据集, 数据集范围见表1。

材料的微观组织及热力学参数对高温合金性能

表1 数据集特征空间  
Tab. 1 Data set feature space

元素 $w_B$ /%													其他		
Ni	Re	Co	Al	Ti	W	Mo	Cr	Ta	C	Y	Nb	Hf	温度/℃	应力/MPa	蠕变寿命/h
52.71~77.26	0~7.5	0~16.86	1~7.5	0~9	0~18.6	0~10.5	0~20.5	0~13.94	0~0.1	0~4.4	0~2.59	0~2	927~1 200	70~345	30~15 000

同样起到重要作用，为对数据集进行补充完善，通过传统物理冶金模型和Thermo-calc批量计算870℃条件下9种反映合金参数的特征<sup>[35-40]</sup>，包含反相畴界能（APBE, Anti-phase boundary energy），有效扩散系数（EDC, Effective diffusion coefficient，剪切模量

（SM, Shear modulus， $\gamma$ 基体通道宽度（ $W_\gamma$ ），层错能（SFE, Stack fault energy）， $\gamma'$ 相溶解温度（ $T_{\gamma'}$ ）， $\gamma'$ 尺寸（ $S_{\gamma'}$ ）， $\gamma'$ 体积分（ $V_{\gamma'}$ ），晶格错配度（LM, Lattice parameters and misfit），计算结果如表2所示。

表2 计算结果汇总（870℃）  
Tab. 2 Summary of calculation results（870℃）

特征	数值	特征	数值
反相畴界能APBE	204~322	$\gamma$ 基体通道宽度 $W_\gamma$	$1.09 \times 10^{-10} \sim 8.84 \times 10^{-9}$
有效扩散系数EDC	$3.65 \times 10^{-6} \sim 1.92 \times 10^{-4}$	$\gamma'$ 相溶解温度 $T_{\gamma'}$	1 121~1 333
剪切模量SM	8~62	$\gamma'$ 尺寸 $S_{\gamma'}$	$2.26 \times 10^{-9} \sim 1.81 \times 10^{-8}$
层错能SFE	123~72	$\gamma'$ 体积分 $V_{\gamma'}$	0.39~0.96
晶格错配度LM	0.92~1.12		

## 1.2 特征工程

数据集构建完成后，经过数据清洗去除数据集内不合理数据点，而后对数据集进行归一化，消除特征之间的维度差异，归一化公式如下：

$$x'_i = \frac{x_i - \min(x)}{\max(x) - \min(x)} \quad (1)$$

式中： $x'_i$ 为数据点 $x_i$ 归一化后的值， $\max(x)$ 与 $\min(x)$ 分别为数据集中最大值与最小值。

将归一化后的数据集按80%/20%的比例划分为训练集和测试集，训练集用于模型训练，测试集用于验证模型的预测能力，同时采用十折交叉验证避免模型过拟合提高泛化能力。

使用决定系数（ $R^2$ ），平均绝对误差（MAE, Mean absolute error），均方根误差（RMSE, Root mean squared error）作为模型性能评价标准，计算方法如下式所示：

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^m (y_i - \hat{y}_i)^2}{\sum_{i=1}^m (y_i - \bar{y})^2} \quad (2)$$

$$MAE = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m |y_i - \hat{y}_i| \quad (3)$$

$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{m} \sum_{i=1}^m (y_i - \hat{y}_i)^2} \quad (4)$$

式中： $m$ 为测试集中样本的数量， $y_i$ 为样本真实值， $\hat{y}_i$

为模型给出的预测值， $\bar{y}$ 为测试集中样本真实值的平均值。

## 1.3 模型评估及优化

在本研究中，基于Python内Sk-learn模块中的多层感知器（MLP, Multilayer Perceptron）算法建立ANN机器学习模型，模型结构如图1所示。

首先使用合金成分与蠕变试验温度及应力作为输入层，蠕变寿命作为输出层建立模型1，在隐含层层数为4层，层内神经元个数分别为150, 120, 80, 40时，模型在训练集内精度达到0.946，在测试集内精度为0.838，存在一定过拟合现象，可能会导致模型泛化能力变差。为检验模型训练效果，将模型训练集与测试集内模型预测值与实际值进行对比，模型1具体描述如图2所示。

在模型1基础上，输入层内添加合金计算参数后建立模型2，在隐含层层数为5层，层内神经元个数分别为150, 100, 60, 30, 15时，模型在训练集内精度为0.947，测试集内精度为0.885，模型2预测精度大幅提升，过拟合倾向消除，模型在未知数据上的泛化能力提高，因此选用模型2进行后续预测工作。模型2的具体评价及在训练集与测试集内预测值与实际值对比如图3所示。

## 1.4 模型可解释性分析

为揭示模型内部黑箱效应，使用SHAP分析对模型

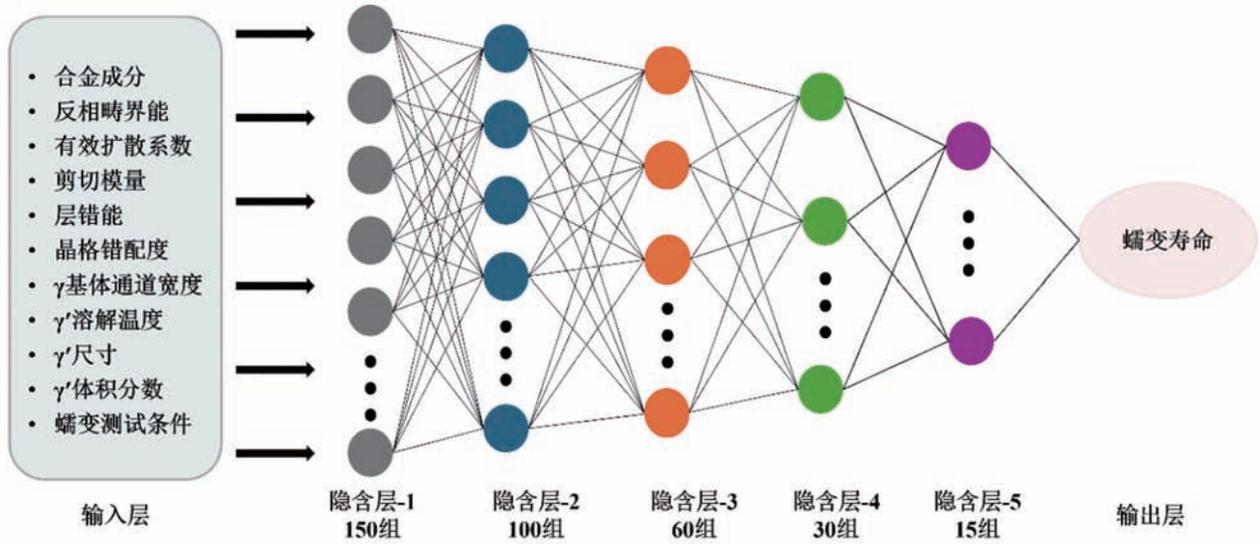


图1 ANN模型结构示意图

Fig. 1 ANN model structure diagram

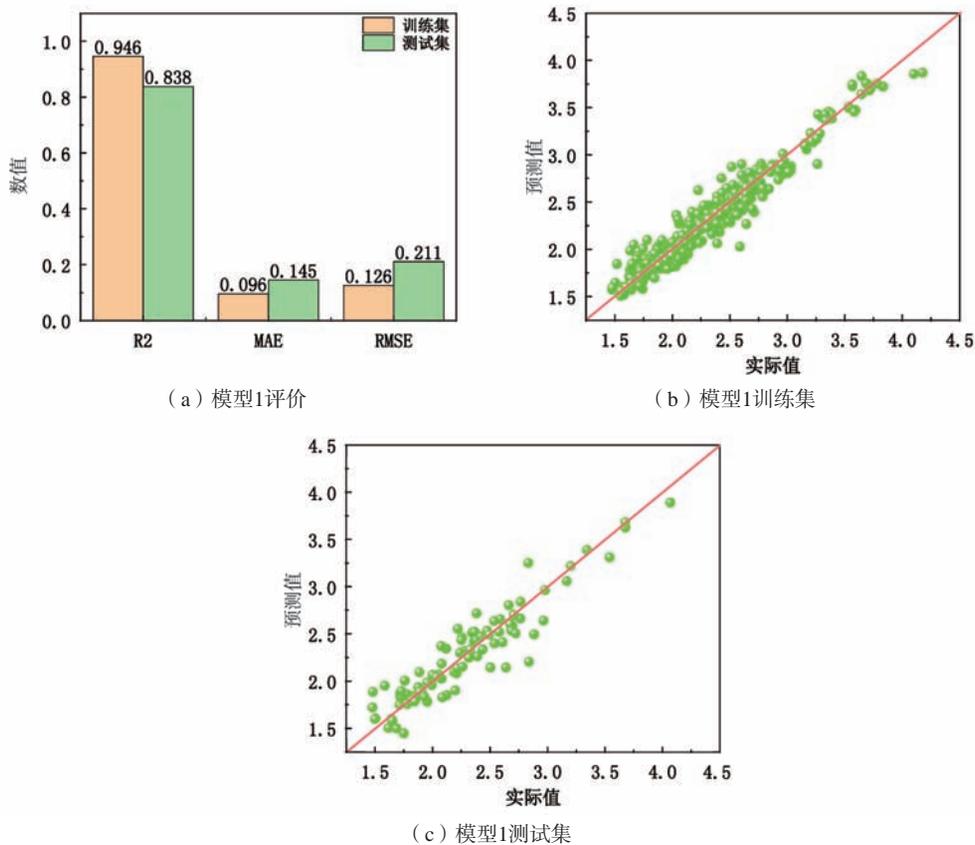


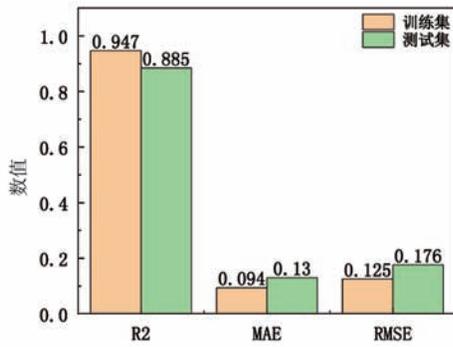
图2 模型1评价及预测结果

Fig. 2 Evaluation and prediction results of model 1

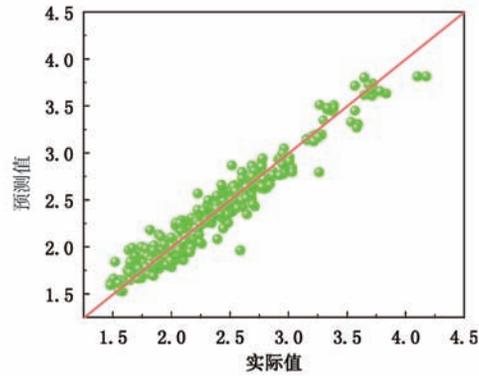
进行可解释性分析<sup>[41]</sup>。如图4所示, SHAP结果表明蠕变测试的温度和应力升高时, 合金蠕变寿命减低。Re元素含量提升,  $\gamma'$ 相溶解温度提高有利于合金蠕变寿命提升, 这也是二代及三代单晶高温合金通过向合金

内添加Re提高蠕变寿命的原因。

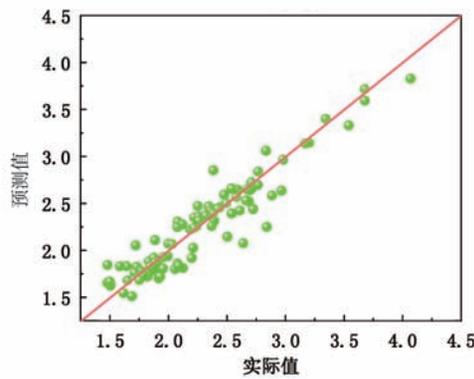
ANN模型不能直接提供特征重要性, 因此我们通过置换重要性 (Permutation Importance) 方法间接评估特征的重要性。该方法通过随机打乱某个特征的值,



(a) 模型2评价



(b) 模型2训练集



(c) 模型2测试集

图3 模型2评价及预测结果

Fig. 3 Evaluation and prediction results of model 2

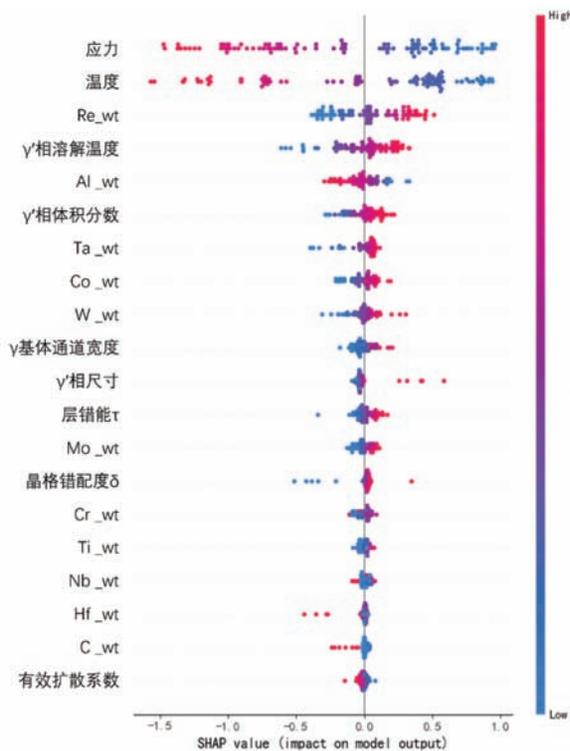


图4 模型2 SHAP分析图

Fig. 4 SHAP analysis diagram of model 2

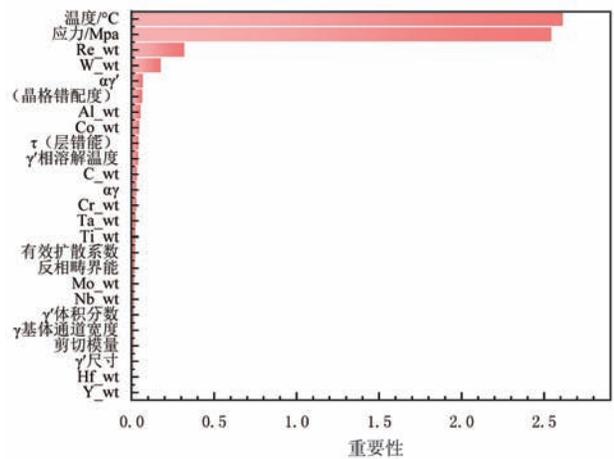


图5 模型2 置换重要性分析图

Fig. 5 Permutation importance analysis diagram of model 2

观察模型性能的变化来评估特征的重要性。如果打乱某个特征后模型的性能显著下降,说明该特征对模型预测的重要性很高。对模型进行置换重要性分析结果如图6所示,与SHAP分析结果类似,测试温度和应力对预测结果起到最大作用。以上影响与传统意义上认识的高温合金蠕变寿命影响因素相符,侧面印证了模

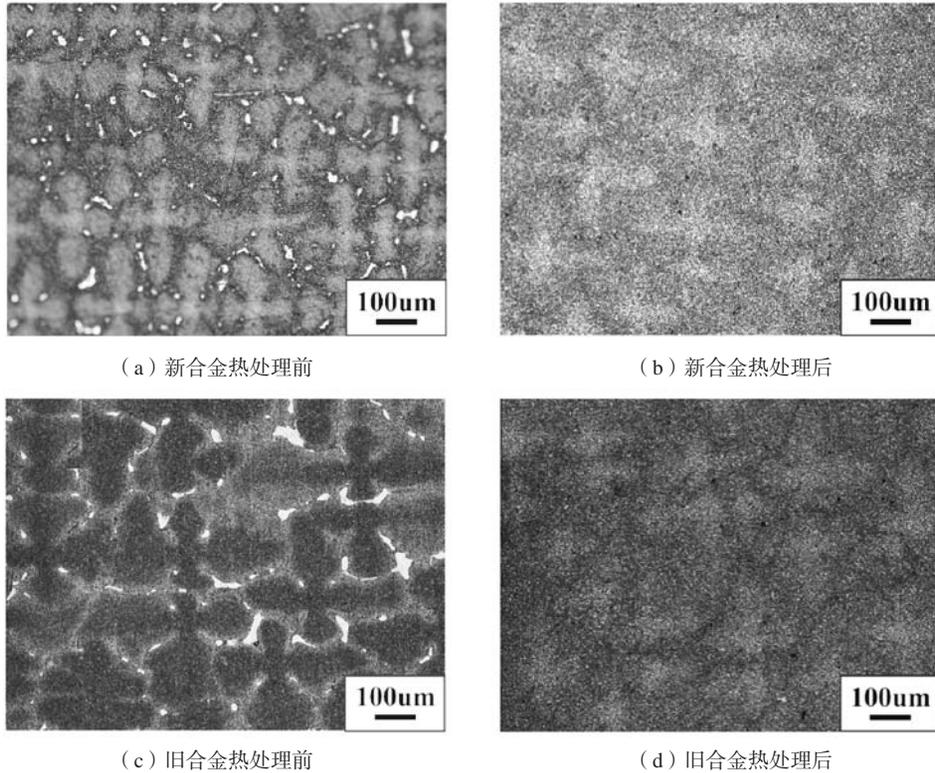


图6 金相显微组织

Fig. 6 Microstructure under metallographic microscope,

型的有效性及将机器学习技术应用于材料开发的可行性。

## 2 模型应用

综上,一个包含显微组织描述符的ANN蠕变寿命预测模型被建立,模型原始数据集覆盖范围广,数据来源可靠,为建立精确的模型提供了坚实的基础,经过特征工程,数据集划分,十折交叉验证,模型参数调整,预测值与真实值对比证明了模型的准确性和泛化能力。因此,将模型进一步应用于单晶高温合金的成分设计。

DD4500是中科院金属研究所研发的低成本无Re二代单晶高温合金,期望通过无Re添加降低合金成本,同时实现高蠕变寿命。将模型应用于DD4500合金的成分优化设计,在合金名义成分范围内利用模型预测,筛选出一条高蠕变寿命的合金成分,将合金配料熔炼后,通过XRF(X射线荧光光谱分析)对母合金实际成分进行测定,新旧合金名义成分及实测成分结果如表3所示,考虑元素偏析的影响,新旧合金成分均在合理范围内。

通过籽晶法制备为 $\Phi 16\text{ mm} \times 8\text{ mm}$ 单晶棒,经 $1\ 280\text{ }^\circ\text{C}/2\text{ h}+1\ 290\text{ }^\circ\text{C}/1\text{ h}+1\ 300\text{ }^\circ\text{C}/2\text{ h}$ 固溶处理, $1\ 080\text{ }^\circ\text{C}/6\text{ h}$ 一次时效和 $870\text{ }^\circ\text{C}/24\text{ h}$ 二次时效的热处理后,分别

表3 新旧合金成分及XRF实测结果  
Tab. 3 Composition of old and new alloys and XRF measured results

合金分类	Co+Cr	Al+Ta+Ti	Mo+W	Hf	Ni	$w_B/\%$
原始合金	13.5	12.7	8	0.6	余量	
原始合金(XRF)	13.43	12.82	8.21	0.55	余量	
新合金	14	13.8	8.7	0.15	余量	
新合金(XRF)	13.87	13.89	8.54	0.17	余量	

取铸态及热处理态合金经过研磨、抛光和腐蚀后进行OM观察,如图6所示,经热处理后,合金内枝晶组织基本消除,共晶组织完全消除,合金均匀化效果良好。

SEM结果如图7所示,铸态合金枝晶干与枝晶间 $\gamma'$ 相尺寸差距大,立方度不佳,经热处理后,合金内组织均匀, $\gamma'$ 相大小均匀,立方度高。在SEM图中随机取5张进行 $\gamma'$ 相尺寸及体积分数统计,结果显示新合金 $\gamma'$ 相平均尺寸为 $0.48\ \mu\text{m}$ ,体积分数为69%,旧合金 $\gamma'$ 相平均尺寸为 $0.65\ \mu\text{m}$ ,体积分数为74%,已有研究表明<sup>[42-43]</sup>,单晶高温合金 $\gamma'$ 相尺寸控制在 $0.2\sim 0.6\ \mu\text{m}$ ,体积分数在60%~70%左右可以获得最佳的性能,新设计合金 $\gamma'$ 强化相尺寸大小,体积分数均在最佳范围内。

将热处理后的单晶棒制备为 $M12 \times 66\text{ mm}$ 持久试

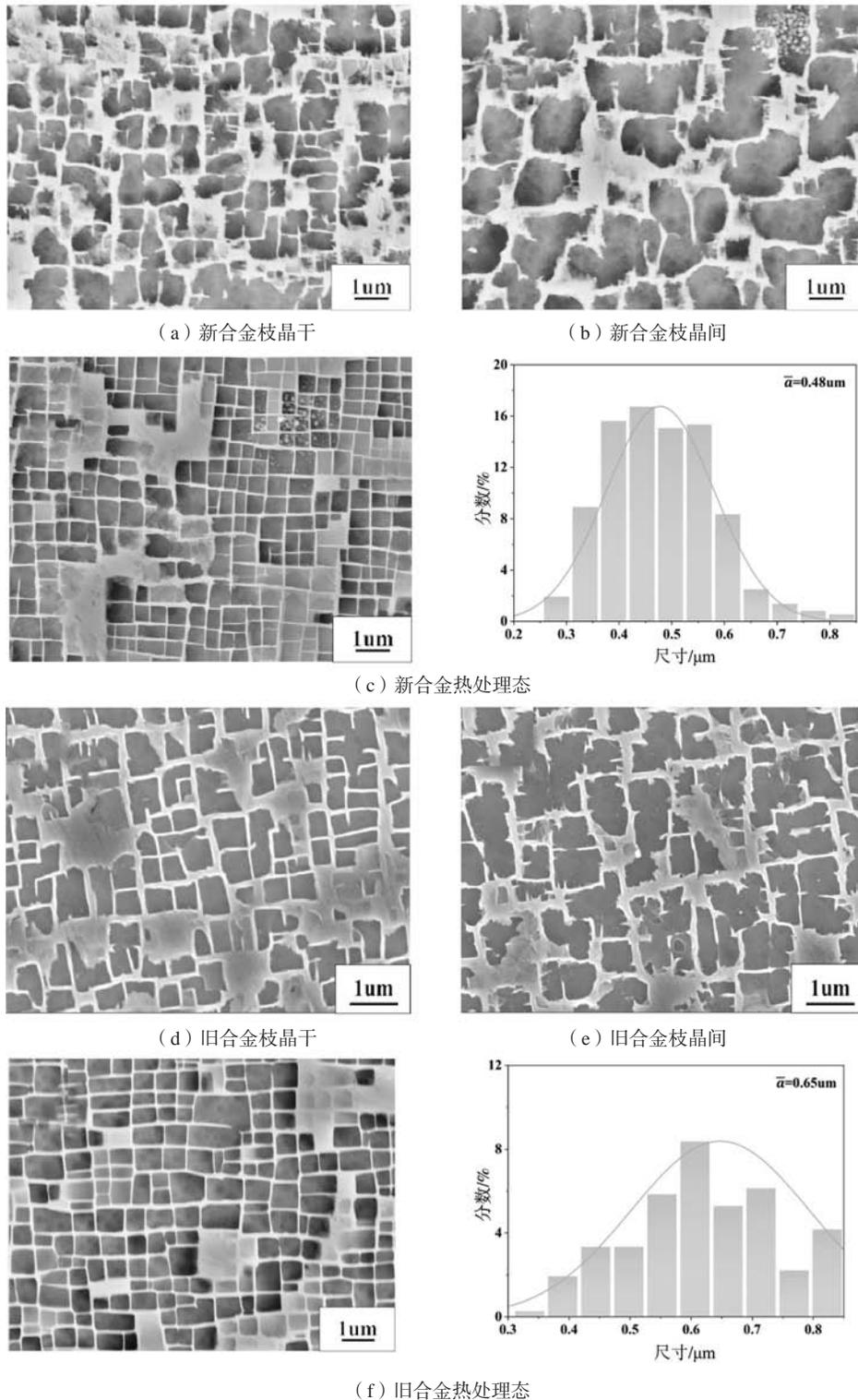


图7 新旧合金SEM图像

Fig. 7 SEM image of improved and original alloy

样，在1 093 °C/158 MPa下进行三组重复持久试验，断口组织扫描图像如图8所示，合金在1 093 °C的高温环境下进行拉伸时，其断裂表面呈现出典型的海绵状断口，并且断口上分布着大量的韧窝和孔洞。这些孔洞

的形成主要归因于合金铸造过程中的Kirkendall效应，这会导致铸造孔洞的产生。此外，在固溶热处理过程中，也会形成均匀化孔洞。这些缺陷在拉伸过程中会形核并逐渐长大，最终相互连接形成更大的缺陷，导

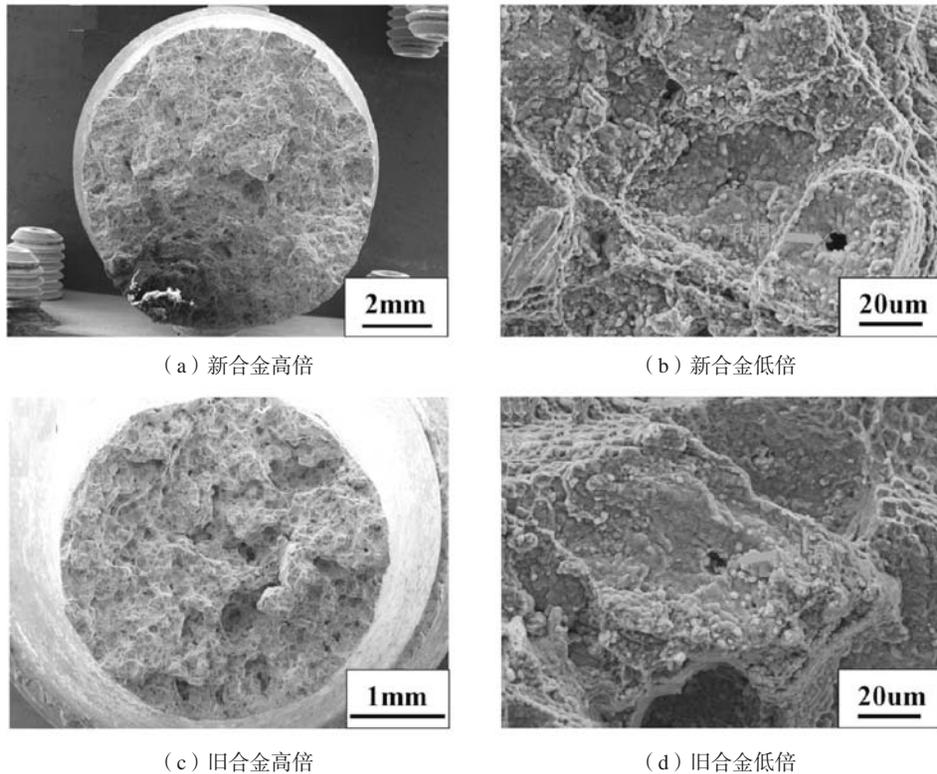


图8 合金断口显微组织

Fig. 8 Microstructure of alloy fracture

致合金的断裂。这种断裂特征是典型的微孔聚集型断裂，也称为韧性断裂。因此，通过控制铸造过程和固溶热处理中产生的孔洞数量和体积分数，可以在一定程度上提升合金在高温下的拉伸性能。

持久寿命、伸长率及断面收缩率试验结果如图9所示，新设计合金的三个持久试样在1 093 °C/158 MPa下的蠕变寿命分别为25 h、31.9 h和30.3 h，远高于原DD4500合金的11.95 h、12.37 h和13.62 h，平均提升幅度超过100%。以伸长率和断面收缩率为代表的合金塑性与原合金相近，满足了DD4500合金低成本高蠕变寿

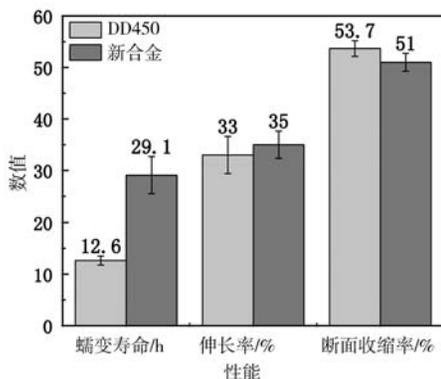


图9 新设计合金与原性能合金持久测试数据

Fig. 9 Durability test data of newly designed alloy and original alloy

命的目标，并显著节约了传统合金成分设计所需的时间成本和经济成本，证明了该模型应用于单晶高温合金成分设计的有效性。

### 3 结论

本研究开发了一种单晶高温合金成分设计方法，基于人工神经网络（ANN），通过集成丰富的试验数据和显微组织参数，实现了对合金蠕变性能的精确预测，从而指导合金成分设计。

(1) 研究开发了一种基于人工神经网络（ANN）的单晶高温合金蠕变寿命预测模型，利用大量试验数据和显微组织参数，有效地构建了精确的ANN模型，降低了过拟合的风险。

(2) 将模型应用于DD4500合金成分优化设计，基于模型预测结果筛选具有优异性能的合金成分，并进行试验验证，结果表明，新设计合金蠕变寿命大幅提升。

(3) 本研究综合考虑了合金成分、热力学参数和显微组织参数对合金性能的影响，通过对模型进行可解释性分析，揭示了合金参数与性能之间的潜在关系，为新型高蠕变性能单晶高温合金的设计提供了新的方法。

在本研究中考虑了合金成分, 合金热力学参数, 合金显微组织参数的影响, 然而, 高温合金的热处理过程也是影响高温合金蠕变寿命的重要因素, 需要在

后续工作中解决。未来, 随着数据量的增加和模型算法的优化, 机器学习有望成为一种高效精准的材料设计工具, 加速新材料研发的进程。

#### 参考文献:

- [1] 毕中南. 航空发动机用高温合金及其制备技术 [J]. 大飞机, 2021 (3): 12-15.
- [2] 鲍俊, 玄伟东, 樊志明, 等. 铸造镍基高温合金K417G中高温拉伸断裂机理研究 [J]. 铸造, 2024, 73 (4): 476-480.
- [3] 曹江, 岳治衡, 王泽宇, 等. 一种高W镍基高温合金的长期高温持久行为 [J]. 铸造, 2024, 73 (10): 1353-1358.
- [4] REED RC. The superalloys: fundamentals and applications [M]. New York: Cambridge University Press, 2006: 1-14.
- [5] 谢秋峰, 熊家帅, 代淑荣, 等. 热处理制度对K417G铸造高温合金组织和性能的影响 [J]. 铸造, 2024, 73 (2): 150-153.
- [6] 孙宝才, 孙颖, 张长日, 等. 一种Ni<sub>3</sub>Al基高温合金冷热疲劳性能研究 [J]. 铸造, 2023, 72 (11): 1399-1403.
- [7] CHEN S, TANG Q, LI Q, et al. High-throughput screening of multicomponent alloy compositions with optimal mechanical properties using two-step diffusion multiple: demo in Al-Co-Cr-Fe-Ni-Ti high-entropy superalloys [J]. Materials Science & Engineering A, 2024, 910: 146909.
- [8] MA Q, LI X, XIN R, et al. Thermodynamic calculation and machine learning aided composition design of new nickel-based superalloys [J]. Journal of Materials Research and Technology, 2023, 26: 4168-4178.
- [9] 吴铮, 李全安, 陈晓亚, 等. 机器学习在镁合金应用中的研究进展 [J]. 工程科学学报, 2024, 46 (10): 1797-1811.
- [10] 艾诚, 蒙安利, 郭敏, 等. 共晶高熵合金成分设计与力学性能的研究进展 [J]. 稀有金属, 2024, 48 (11): 1612-1622.
- [11] LIU Y, NIU C, WANG Z, et al. Machine learning in materials genome initiative: a review [J]. Journal of Materials Science and Technology, 2020, 57: 113-122.
- [12] LU Z, ZHANG Y, LI W, et al. Materials genome strategy for metallic glasses [J]. Journal of Materials Science and Technology, 2023, 166: 173-199.
- [13] LIU F, WANG Z, WANG Z, et al. High-throughput method-accelerated design of Ni-based superalloys [J]. Advanced Functional Materials, 2022, 32: 2109367.
- [14] WANG Z, ZHANG L, LI W, et al. High throughput experiment assisted discovery of new Ni-base superalloys-sciencedirect [J]. Scripta Materialia, 2020, 178: 134-138.
- [15] 谢建新, 宿彦京, 薛德祯, 等. 机器学习在材料研发中的应用 [J]. 金属学报, 2021, 57 (11): 1343-1361.
- [16] ZOU M, LI W D, LI L F, et al. Machine learning assisted design approach for developing  $\gamma'$ -strengthened Co-Ni-base superalloys [C]// Superalloys 2020, Cham: Springer, 2020: 937-947.
- [17] YU J, GUO S, CHEN Y, et al. A two-stage predicting model for  $\gamma'$  solvus temperature of L12-strengthened Co-base superalloys based on machine learning [J]. Intermetallics, 2019, 110: 106466.
- [18] FU C, CHEN Y, LI L, et al. Evaluation of service conditions of high pressure turbine blades made of DS Ni-base superalloy by artificial neural networks [J]. Materials Today Communications, 2020, 22: 100838.
- [19] JIANG X, YIN H, 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.
- [20] WANG C, SHEN C, CUI Q, et al. Tensile property prediction by feature engineering guided machine learning in reduced activation ferritic/martensitic steels [J]. Journal of Nuclear Materials, 2020, 529: 151823.
- [21] GUO S, YU J, LIU X, et al. A predicting model for properties of steel using the industrial big data based on machine learning [J]. Computational Materials Science, 2019, 160: 95-104.
- [22] 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.
- [23] HU X, WANG J, WANG Y, et al. Two-way design of alloys for advanced ultra supercritical plants based on machine learning [J]. Computational Materials Science, 2018, 155: 331-339.
- [24] 张静. 基于人工神经网络的材料力学性能预测 [J]. 上海电机学院学报, 2006 (5): 20-23.
- [25] 张驰, 郭媛, 黎明. 人工神经网络模型发展及应用综述 [J]. 计算机工程与应用, 2021, 57 (11): 57-69.
- [26] 于志省, 李应成, 王宇遥, 等. 人工神经网络在材料开发中的应用研究进展 [J]. 工程塑料应用, 2023, 51 (2): 158-164.
- [27] 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.
- [28] 李军伟, 彭志方. 用人工神经网络法预测镍基单晶高温合金的蠕变断裂寿命 [J]. 金属学报, 2004 (3): 257-262.

- [29] BUCHAKJIAN L, DAROLIA R, WUKUSICK C S. Heat treatment for nickel-base superalloys: US Patent, 5100484 [P]. 1992.
- [30] DUHL D N. Heat treated superalloy single crystal article and process: US Patent, 4209348 [P]. 1980.
- [31] ROSS E, WUKUSICK C S, KING W T. Nickel-based superalloys for producing single crystal articles having improved tolerance to low angle grain boundaries: US Patent, 5399313 [P]. 1995.
- [32] SCHWEIZER F. Single crystal nickel-base superalloy: US Patent, 4765850 [P]. 1988.
- [33] SHAW S. Nickel-base superalloy: US Patent, 4207098 [P]. 1981.
- [34] CHIN S, DUHL D. High strength single crystal superalloys: US Patent, 4908183 [P]. 1987.
- [35] RU Y, ZHAO H, ZHANG H, et al. Design for anomalous yield in  $\gamma'$ -strengthening superalloys [J]. *Materials & Design*, 2019, 183: 108082.
- [36] KUMAR K. Tuning planar fault energies of Ni<sub>3</sub>Al with substitutional alloying: first-principles description for guiding rational alloy design [J]. *Scripta Materialia*, 2018, 142: 74–78.
- [37] ZHU Z, BASOALTO H, WARNKEN N, et al. A model for the creep deformation behaviour of nickel-based single crystal superalloys [J]. *Acta Materialia*, 2012, 60: 4888–4900.
- [38] KIM Y K, KIM D, KIM H K, et al. An intermediate temperature creep model for Ni-based superalloys [J]. *International Journal of Plasticity*, 2016, 79: 153–175.
- [39] CARON P. High  $\gamma'$  solvus new generation nickel-based superalloys for single crystal turbine blade applications [J]. *Superalloys*, 2000: 737–746.
- [40] REED R C, TAO T, WARNKEN N. Alloys-by-design: application to nickel-based single crystal superalloys [J]. *Acta Materialia*, 2009, 57: 5898–5913.
- [41] MAKUMBURA R K, MAMPITIYA L, RATHNAYAKE N, et al. Advancing water quality assessment and prediction using machine learning models, coupled with explainable artificial intelligence (XAI) techniques like shapley additive explanations (SHAP) for interpreting the black-box nature [J]. *Results in Engineering*, 2024, 23: 102831.
- [42] MURAKUMO T, KOBAYASHI T, KOIZUMI Y, et al. Creep behaviour of Ni-base single-crystal superalloys with various  $\gamma'$  volume fraction [J]. *Acta Materialia*, 2004, 52: 3737–3744.
- [43] NATHAL M V. Effect of initial gamma prime size on the elevated temperature creep properties of single crystal nickel base superalloys [J]. *Metallurgical Transactions A*, 1987, 18 ( 11 ) : 1961–1970.

---

## Creep Life Prediction Model of Nickel-Based Single Crystal Superalloy Based on Artificial Neural Network and Its Application

LI Chun-yu<sup>1,2</sup>, LIU Ji-de<sup>2</sup>, ZHANG Wen-ying<sup>1,2</sup>, WANG Jia-jian<sup>2</sup>, ZHU Chong-wei<sup>2</sup>, LI Jin-guo<sup>2</sup>

(1. School of Materials Science and Engineering, Northeastern University, Shenyang 110000, Liaoning, China; 2. Institute of Metal Research, Chinese Academy of Sciences, Shenyang 110000, Liaoning, China)

### Abstract:

Nickel-based single crystal superalloys are widely used in hot-end components of aeroengines due to their superior high temperature strength. Creep life is an important indicator to measure the performance of single crystal superalloys. This study performed the creep life prediction of superalloy through the establishment of ANN machine learning model. The parameters of microstructure were applied to increase the accuracy, which reduced the overfitting tendency and improved the generalization ability of the model. The model was utilized to optimize the DD4500 alloy composition through inverse design, resulting in a significant improvement in the creep life of the newly designed alloy compared to the original alloy. This success further validates the effectiveness of applying machine learning techniques in materials science.

### Key words:

nickel-based single crystal superalloy; creep life prediction; machine learning; ANN model