

引用格式: 何玄, 宋鹏, 孔德昊, 等. 机器学习技术在航空材料领域的应用[J]. 航空材料学报, 2025, 45(3): 85-104.

HE Xuan, SONG Peng, KONG Dehao, et al. Application of machine learning technology in field of aviation materials[J]. Journal of Aeronautical Materials, 2025, 45(3): 85-104.

## 机器学习技术在航空材料领域的应用

何玄<sup>1</sup>, 宋鹏<sup>1,2,3,4\*</sup>, 孔德昊<sup>2</sup>, 黄太红<sup>1,4</sup>, 李青<sup>1</sup>

(1. 昆明理工大学材料科学与工程学院, 昆明 650093; 2. 昆明理工大学民航与航空学院, 昆明 650093; 3. 云南省内燃机清洁排放技术国际联合研发中心, 昆明 650093; 4. 云南省粉体材料工程研究中心, 昆明 650093)

**摘要:** 机器学习技术在航空材料领域具有广阔的发展前景, 并在材料选择、设计和优化等方面发挥着重要作用。首先简要论述机器学习技术在航空领域中的优势和潜力, 概述机器学习的技术发展、算法类别和特征及其局限性, 介绍机器学习在科学研究中, 特别是复杂材料数据形式下的常规或潜在的应用。其次, 主要关注机器学习在航空材料领域的研究现状, 探讨近年来利用机器学习辅助高温合金材料、高强度结构材料、热防护涂层材料及功能与智能材料的研究进展, 并阐述机器学习驱动航空材料研究的策略和方法。最后, 对机器学习辅助航空材料研发所面临的挑战进行展望, 通过推动数据资源的开放共享、深化领域知识和物理规律在机器学习模型中的融合, 以及不同类型数据的特征一致性转换, 助力航空材料研究向大数据驱动的材料科学第四范式转型。

**关键词:** 机器学习; 航空材料; 高温合金; 热障涂层; 结构与性能预测

**doi:** 10.11868/j.issn.1005-5053.2024.000059

**中图分类号:** V250.1; TB33

**文献标识码:** A

**文章编号:** 1005-5053(2025)03-0085-20

## Application of machine learning technology in field of aviation materials

HE Xuan<sup>1</sup>, SONG Peng<sup>1,2,3,4\*</sup>, KONG Dehao<sup>2</sup>, HUANG Taihong<sup>1,4</sup>, LI Qing<sup>1</sup>

(1. Faculty of Materials Science and Engineering, Kunming University of Science and Technology, Kunming 650093, China; 2. Faculty of Civil Aviation and Aeronautics, Kunming University of Science and Technology, Kunming 650093, China; 3. Yunnan International Joint Research Center for Clean Exhaust Technology of Internal Combustion Engines, Kunming 650093, China; 4. Yunnan Engineering Research Center of Metallic Powder Materials, Kunming 650093, China)

**Abstract:** The machine learning technology has broad prospects in the field of aerospace materials and plays an important role in material selection, design, and optimization. Firstly, a brief discussion was made on the advantages and potential of machine learning technology in the aerospace field, outlining the technological developments, algorithm categories, features, and limitations. The conventional or potential applications of machine learning in scientific exploration, especially in complex material data formats, are introduced. Secondly, the research status of machine learning in aviation materials is mainly focused on, discussing the recent progress in utilizing machine learning to assist in the research of high-temperature alloy materials, high-strength structural materials, thermal protection coating materials, as well as functional and smart materials. The strategies and methods of machine learning-driven aviation material research are elucidated. Finally, the challenges encountered in machine learning-assisted aerospace material research and development are examined. Facilitating the transformation of aerospace material research towards the fourth paradigm of data-driven materials science necessitates efforts in promoting the open sharing of data resources, integrating domain knowledge and physical laws more deeply into machine learning models, and ensuring feature consistency across different data types.

**Key words:** machine learning; aviation materials; superalloys; thermal barrier coatings; structure and performance prediction

随着科技的发展,机器学习和人工智能算法成为这个时代最重要的技术之一。作为科学研究第四范式的代表技术,机器学习将成为大规模数据处理和分析的有效工具和新方法。通过训练和学习数据之间关联性,机器学习可以发现其中隐含的关系、规律和趋势,以提取有用的信息和模式<sup>[1]</sup>。机器学习在诸多领域取得显著成功,如计算机视觉、自然语言处理和生成对抗网络。同时,在物理学主导的工程学科中,越来越多新的机器学习模式正在研究和验证。特别是在需要处理、分析和应用大数据量的项目或任务,机器学习有效推动了数据驱动科学和工程的进步。

数据驱动在科学和工程领域并非仅代表着数据分析,而是作为一种全新的研究方法论,通过合理地收集、分析和利用数据,并与传统的理论、实验和数值探究等研究方法相辅相成,实现对科学研究和工程创新发展的推动<sup>[2]</sup>。数据驱动科学和工程的进步得益于多因素的融合推动,包括海量且不断增长的数据、高性能计算的进步、传感技术和数据存储与传输技术的发展、统计学和应用数学等可

扩展算法的应用以及部分高技术产业面临的软件和测试技术垄断(垄断迫使行业通过数据驱动方法从海量数据中挖掘潜在规律,降低对垄断技术的依赖)等问题<sup>[3]</sup>。航空产业作为高质量、高科技、高端制造的行业领域,不仅依赖大量的资源投入,还拥有丰富的数据资源。这为数据驱动模式下机器学习方法的发展和應用提供了独特的机遇和挑战。

机器学习技术在航空工业中具有广阔的发展前景,并且在多个方面都能发挥重要作用,如图1所示。首先,它可以应用于航空飞行器的设计、测试和评估等环节,为提高飞行安全、调度飞机和地面设施资源以及拓展航空业务提供潜在的积极意义。通过分析传感器数据、监测设备状态、维护记录和历史故障数据,机器学习可以准确预测飞机部件的寿命和维护需求<sup>[4-5]</sup>,进而制定更有效的维护计划,提前预测和防止故障产生,降低维修成本,提高飞机的可用性和安全性。此外,在生产制造方面,机器学习可以实时监控和分析生产线工艺数据,帮助识别生产瓶颈,调整生产资源分配,从而优化生产效率和稳定性,提升生产线的吞吐量和质

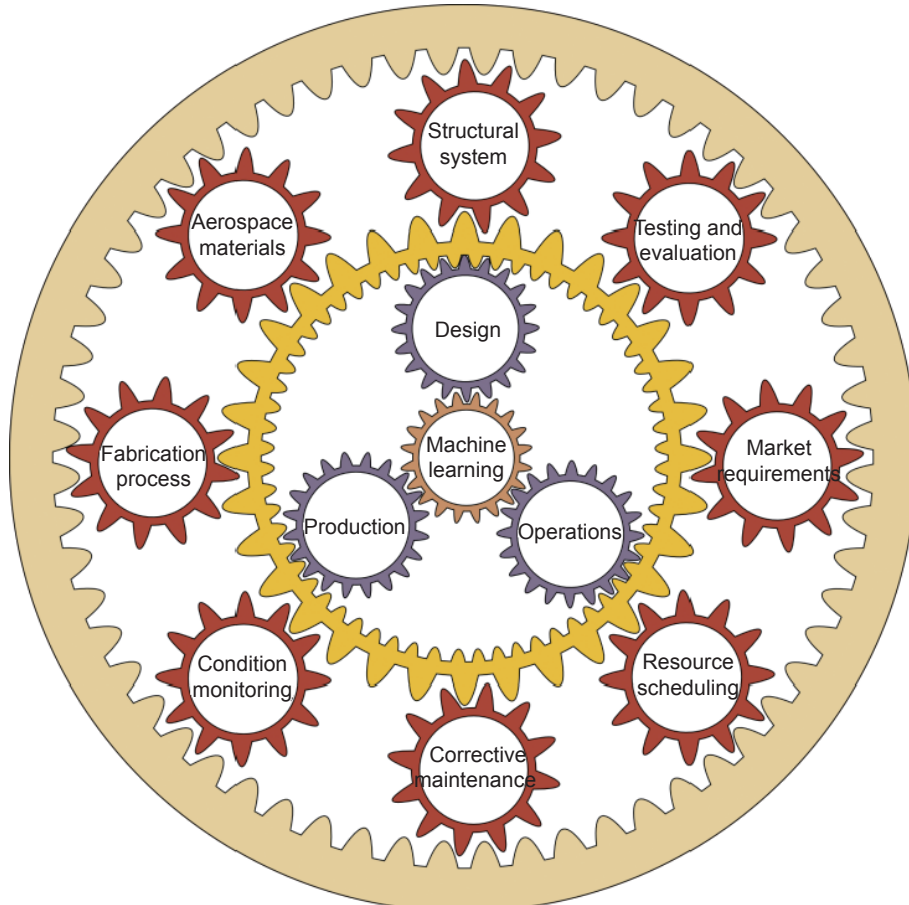


图1 机器学习在航空工业的应用

Fig. 1 Application of machine learning in the aviation industry

量<sup>[6-7]</sup>。同时,机器学习还能够分析供应链数据、市场趋势以及顾客反馈信息,以帮助预测需求并优化航班计划,从而提高运营效率和服务质量。综上所述,机器学习技术在航空领域的应用能够为行业带来诸多益处。

航空领域一直是新材料和新技术发展的关键领域。科技的不断进步和创新推动着研究人员不断探索和开发高性能航空材料及其制备技术,以提升飞机的性能、安全性和可持续性。许多新材料的引入为航空器的设计和制造带来重大突破。例如碳纤维复合材料在飞行器结构中的应用,在显著减轻飞行器质量的同时保持了优异的结构强度,从而降低燃料消耗和碳排放<sup>[8-9]</sup>。此外,航空领域还积极探索其他新材料与技术的应用,如陶瓷基复合材料<sup>[10-11]</sup>和3D打印技术<sup>[12]</sup>,以进一步推动飞机的性能和效率提升。技术革新也在不断改变航空领域。例如,计算机建模和数值仿真技术的应用可以实现更高效的飞机外流场计算、气动特性分析、结构静/动强度计算和电磁效应分析等,从而缩短研制周期并降低研制成本<sup>[13-14]</sup>。人工智能和大数据分析技术的应用将进一步加速航空材料的研制和集成化飞行系统的设计,推动航空工程的创新,为未来的航空航天发展提供更安全、高效和环保的解决方案。

随着高通量实验和模拟计算在材料研究中的应用和普及,研究数据的增长速度迎来了一次大爆发。如何更高效地解释、筛选和利用海量的实验和计算数据已成为现阶段材料领域的主要课题之一。人工智能革命驱使机器学习应用于材料性能预测和探索新材料,形成材料科学与计算机科学交

叉领域的新研究热点<sup>[15]</sup>。在材料科学研究中,经典模型的建立通常依赖于能量守恒定律和热力学等物理模型,然后通过数据推导出参数回归的数学公式<sup>[16]</sup>。然而,机器学习与传统方法有所不同。机器学习拥有强大的数据处理、数据挖掘和信息洞察能力,因此不依赖任何特定的材料学原理或经验公式。它只需要根据可用数据进行编码与降维,然后以梯度下降的方式训练模型,从而研究数据的规律和规则。在分析数据间复杂的非线性关系方面,机器学习具有无可比拟的优势。因此,机器学习逐渐成为优化材料选择、设计和应用的重要手段。

航空材料是航空产品的核心之一,决定了航空零部件的性能、寿命和可靠性。随着航空技术的进步,航空材料对航空产业的贡献愈发突出,成为航空领域发展的重要支撑。机器学习的应用为航空材料研究带来新的机遇。目前,将机器学习应用于航空材料研究,通过分析预测物理和化学特性,帮助科研人员 and 工程师更快速地进行材料筛选和鉴定,从而加速新材料的开发<sup>[17]</sup>,已成为热点研究领域而受到科研人员的广泛关注。航空材料中的机器学习实现流程如图2所示,其可以通过训练模型学习不同材料的特征和模式,实现对不同类型材料的自动识别和分类<sup>[18-19]</sup>。此外,将机器学习用于学习材料特性与其组成<sup>[20-22]</sup>、晶体结构<sup>[23-24]</sup>、处理条件<sup>[25-26]</sup>等之间的关系,可以帮助理解材料的行为,并设计出更高性能、更轻、更耐用的新航空材料。在检测和预测航空材料中的缺陷和失效方面,通过分析大量的材料测试和表征数据,机器学习模型可以学习到材料的缺陷类型和失效模式<sup>[27]</sup>,并建立起材料失效行为与使用寿命之间的联系。这有助于

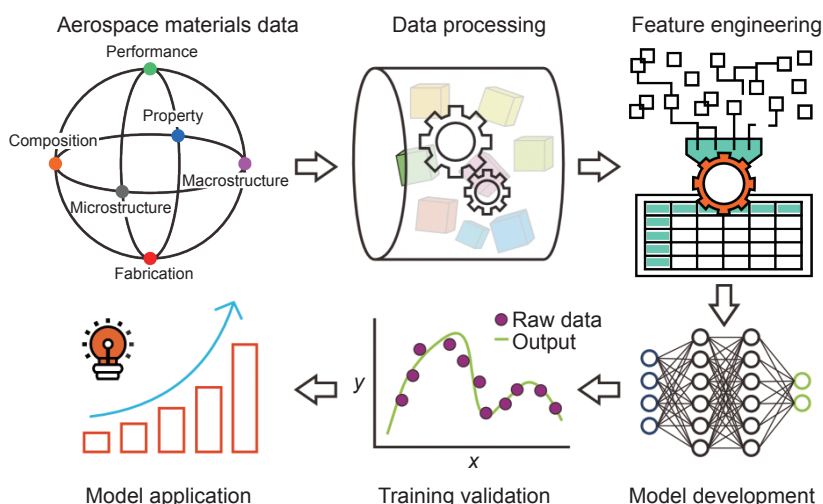


图2 航空材料中的机器学习实现流程

Fig. 2 Machine learning implementation process in aviation materials

评价材料的服役性能,辅助材料的设计和优化。总之,机器学习在航空材料领域的应用可以提高材料设计的效率,预测材料的性能和失效,并帮助研究人员和工程师更好地理解、开发和利用新型航空材料。

本综述将介绍机器学习在航空材料方面应用,主要集中在材料系统的构筑和性能的预测评价。描述机器学习技术发展、主要类别与算法特征,包括应用现状和局限性,也论述机器学习驱动科学研究的优势和潜力。关于机器学习与材料科学结合的方式,介绍复杂材料数据形式通过机器学习实现研究目标的常规或潜在方法。总结机器学习算法对材料数据拟合和映射中的作用,重点介绍近年来利用机器学习辅助航空领域高温合金、高强度结构材料、热防护涂层与功能和智能材料的研究进展。揭示机器学习在航空材料研究中的主要策略和基本方法,以及其他突破和热点。推动航空材料研究向大数据驱动的材料科学的第四范式阶段转型。

## 1 航空材料研发中的机器学习技术

将机器学习与材料研究结合是近年来材料科学领域发展的重要趋势。因为机器学习模型能实现复杂且具有高度非线性的数据关联性分析与预测。由于其网络架构通常具有多个隐藏层的神经网络,例如多层感知机(MLP),卷积神经网络(CNN)和递归神经网络(RNN)等,因此表现出强大的学习能力,实现高维度、复杂且离散的材料数据的拟合。同时,以支持向量机(SVM)分类算法为代表的核方法,例如高斯核、多项式核或 Sigmoid 核等<sup>[28]</sup>,可通过将数据非线性映射到高维空间并进行求解,无需显式定义非线性变换即可捕获材料数据的非线性模式。此外,作为机器学习模型的重要环节,特征工程可以通过对数据特征应用例如非线性编码、多项式数据变换等数学处理,在引入非线性的同时增强模型表达能力。又或者通过特征交互,在现有数据特征中建立新特征,进一步加强模型捕捉复杂材料数据关联性的能力<sup>[29-30]</sup>。在此基础上,将多个模型的预测结果进行融合的集成学习方法可以实现模型的泛化能力和鲁棒性的进一步提高<sup>[31]</sup>,并在解决材料设计与性能预测中多目标优化问题上表现出很大的潜力。

### 1.1 机器学习技术发展历程

机器学习技术的发展历程可以追溯到 20 世纪 50 年代,当时人工智能研究人员开始探索计算机学

习从数据中获取知识的能力。在这一阶段,机器学习这一术语被提出并定义为可以提供计算机能力而无需显式编程的研究领域<sup>[32]</sup>。早期的机器学习算法主要基于符号推理,依赖对数据的显式编码知识。感知机作为研究初期人工神经网络,取得一定进展,但由于符号推理方法难以扩展到复杂任务,并受到 XOR 问题指出的线性不可分的数据分布上失效的困扰,导致其发展陷入停滞<sup>[33]</sup>。直到 20 世纪 80 年代,机器学习研究开始转向基于连接主义的方法。这使得模型能够从数据中学习复杂的模式,而无需显式编码知识。这个阶段的代表性成果包括基于神经网络反向传播(BP)算法提出的多层感知机模型和决策树<sup>[34-35]</sup>。这些革命性算法的提出及其改进算法不仅活跃在目前的机器学习领域中,而且成为后来深度学习发展的基石。

20 世纪 90 年代,随着统计学习理论的发展,机器学习开始与统计学联系紧密。统计方法在机器学习中的应用使得模型能够从更大的数据集学习,并提高了其准确性。支持向量机算法的提出作为机器学习领域的重要突破之一,利用关于凸优化、泛化边际和核函数的深厚理论,同时也具有强大的实证结果,因此在研究热度上甚至超过在当时被发现存在梯度消失问题<sup>[36]</sup>的神经网络算法。在此阶段,代表机器学习技术另一分支的随机森林算法,通过构建与融合多个决策树来获得最终预测结果<sup>[37]</sup>,极大促进了集成学习思想的发展。21 世纪以来,深度学习作为一种基于人工神经网络的机器学习方法,其利用多层次的非线性变换来建模复杂的关系,展现出极大的潜力。随着数据量的爆炸式增长和计算能力的提升,深度学习在图像识别、自然语言处理等领域取得重大突破。特别是 AlexNet 在 ImageNet 图像识别挑战赛上取得的成绩<sup>[38]</sup>,标志着深度学习的崛起。在此阶段,善于利用图像的网格性质的卷积神经网络,以及通过结合对过去元素的记忆来处理文本或语音等顺序数据的递归神经网络等一系列重要的机器学习架构,突破了传统机器学习方法在处理特征数据类型的局限性,使得深度学习技术得到广泛的关注和认可,并推动其在包括航空材料在内的相关领域的应用。

### 1.2 机器学习驱动的科学范式

AI for science,即人工智能驱动科学研究,旨在通过机器学习等技术解决科学问题,推动科学发展和创新的新研究范式。随着机器学习技术的高速发展和不断普及,其已经成为许多科学领域中的重要工具,为研究人员提供了强大的数据处理、模

式识别和预测能力<sup>[39-40]</sup>。机器学习在科学研究中的应用涵盖了众多领域,包括但不限于天文学、生物学、化学、物理学、地球科学等。机器学习在以下几个方面展现出特别的价值和潜力。首先,科学研究产生的数据量庞大且复杂,例如生物医学研究中庞大的人类基因组与蛋白质组数据,以及每天以数PB量级增加的天文观测数据等。应用机器学习进行数据分析和挖掘,可以实现快速准确地提取数据中的模式和规律,为科学研究提供有力支持。其次,机器学习可以驱动实验的参数化设计和模型优化<sup>[41-42]</sup>。科学研究中实验方法往往需要耗费大量的时间和资源,并且常常需要建立复杂的数学模型来描述实验现象和预测实验结果。使用机器学习算法来分析历史实验与模型数据,可以帮助预测哪些参数组合和架构可能会导致最佳的结果,自动地调整实验设计参数与模型超参数,以最小化资源的使用并最大化研究结果的信息量、效率和准确性。

此外,机器学习在加速科学计算方面具有独特优势,特别是材料科学中高维非线性数据预测和多尺度计算问题,机器学习可以发掘科学计算任务中的规律和模式,从而改进计算方法或构建高效的代理模型,替代传统的高成本计算方法,提高计算速度和效率。其中典型的应用是在密度泛函计算中,传统方法获取其材料特性和性能等信息时面临计算时间周期过长和高昂的计算成本。而将机器学习与DFT计算相结合,通过DFT模拟计算获取相应的材料数据,经过特征工程提取并用于后续机器学习输入数据集,通过训练机器学习模型发掘数据之间的模式和关系,可以在面对复杂的材料系统时实现高效的材料发现和性能预测<sup>[43]</sup>。不仅如此,在分子动力学等模拟分析方法中,往往需要势函数来描述原子之间相互作用,从而决定原子运动的轨迹和体系的性质。然而,不论是通过实验数据拟合还是使用DFT等方法求解,势函数的获取都是一个复杂且困难的过程。而应用机器学习技术开发基于数据驱动的势函数学习,可直接从数据中学习原子构型和能量之间的复杂关系,无需预先定义势函数的形式而获得势函数的参数<sup>[44]</sup>。而基于物理模型的机器学习势函数修正方法,则可以根据定义的DFT等物理模型,自动化修正模型的参数以使其更好地拟合数据,从而提高计算精度,提升势函数的准确性<sup>[45-46]</sup>。现阶段在航空材料的研发中,会涉及并应用多种机器学习模型。这些模型主要包括经典分类与回归模型、计算机视觉模型以及自然语言处理模型,如图3所示。

### 1.3 航空材料研究中的机器学习模型

#### 1.3.1 经典分类与回归模型

经典的分类和回归模型广泛应用于航空材料研究,主要用于处理线性可分或近似线性可分的材料数据。分类模型通常利用随机森林(RF)和K最近邻分类(KNN)等算法,根据材料的元素组成、晶体结构、性能或其他表征数据实现识别和分类<sup>[47]</sup>。这些信息对于特定应用背景的材料发现、表征和选择至关重要。此外,分类模型还能根据温度、压力或其他外部条件分析和预测材料的相组成或相变过程<sup>[48]</sup>,这对于研究不同环境下的材料行为和设计准则具有重要意义。此外,部分研究使用分类模型判定材料的一致性,辅助材料制造过程中的质量控制。在航空材料研究中,回归模型的目标是构建不同输入参数与材料特性或性能之间的关系。这些模型使用统计技术,如线性回归、多项式回归或高斯过程来分析和预测连续变量。回归模型在航空材料的应用可以根据成分、加工条件或微观结构特征等输入参数准确预测材料性能,例如硬度、断裂韧度、电导率或热膨胀系数,从而辅助材料设计并

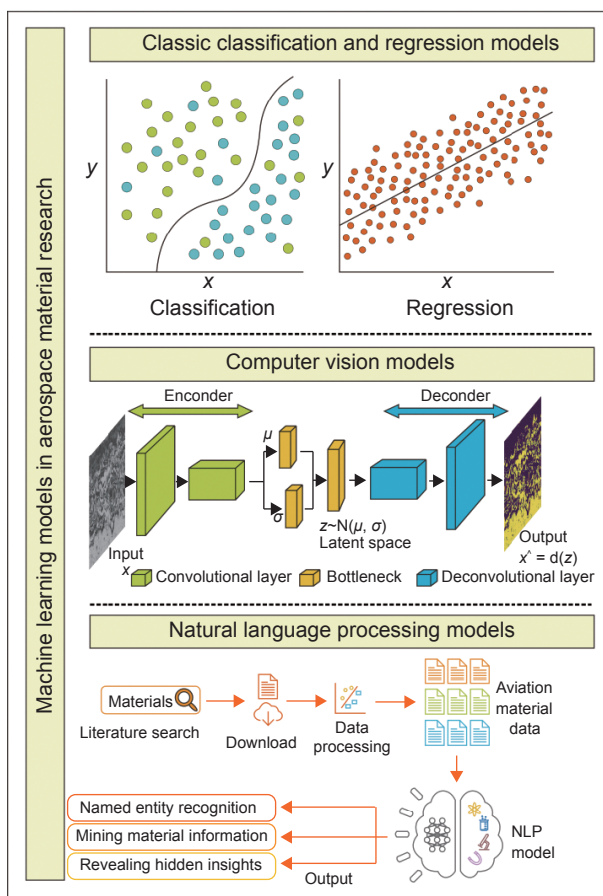


图3 航空材料研究中的机器学习模型

Fig. 3 Machine learning model in aerospace materials research and development

针对特定应用优化性能<sup>[49]</sup>。同时,使用回归模型分析工艺变量和材料响应之间的关系,有助于确定材料合成、热处理或制造技术的最佳条件,从而优化材料加工参数。当将回归模型应用于描述和预测材料在不同服役条件下的行为,例如应力状态、蠕变或疲劳寿命等,可以在实际应用中模拟和分析材料性能。

经典分类和回归模型已被证明是材料科学中有价值的工具,但也有一些需要考虑到的局限性,可能会影响相关模型在某些场景中的准确性、可靠性和适用性。经典的分类和回归模型假设输入参数与材料特性或行为之间存在线性或近线性的关系,并且很大程度上依赖于训练和验证数据的可用性和质量,才能获得良好的泛化能力。在材料研究中,由于材料的复杂性和可变性、实验条件和成本限制,获得可靠的数据是具有一定的挑战性的。同时,数据不足或数据质量差等问题存在可能导致模型存在偏差,造成模型对材料现象的预测不准确或不完整。

### 1.3.2 计算机视觉模型

计算机视觉模型在许多领域展现出巨大的潜力和应用前景。例如,在医学领域可以辅助分析影像数据进行疾病诊断和制定治疗方案,在农业领域可以监测作物生长状况和病虫害情况等。航空材料领域的研究人员对计算机视觉模型也表现出极大的关注,这是因为该类模型可以实现与材料相关的视觉数据的分析和解释。特别是与材料形貌分析检测方法相结合,可以高效地提取信息和评价材料行为,准确识别和表征各种材料的成分分布和形态特征,包括晶体结构分类、晶界量化、纹理与相位分布等,实现微观尺度下的材料结构分析<sup>[50]</sup>。基于计算机视觉模型的自动化测试和分析方法可以在提高材料研究效率的同时减少人为因素的影响,并实现对大规模微观结构信息的批量化运算。此外,计算机视觉模型还可以检测和分类材料中的缺陷,如裂纹、孔洞、夹杂物等,实现自动化缺陷识别,从而判定材料加工质量、服役周期与性能演化等<sup>[51-52]</sup>。与传统的耗时且昂贵的实验程序相比,计算机视觉模型提供了一种更低成本且更通用的方法,快速无损地预测材料物理与化学特征,如孔隙率、晶粒尺寸和机械强度等。基于材料图像的自动分析,可以指导研究人员为特定应用环境选择最有前景的候选材料系统。此外,计算机视觉模型还可以用于分析航空制造过程中的图像或视频,以实时检测和调控工艺参数,确保航空产品符合质量标

准,提高整体生产质量。

计算机视觉模型在材料科学中的应用涵盖了微观结构分析、表面缺陷检测、材料性能预测、材料合成、实时监控和质量控制等多个方面。这些模型提供了自动化和高效的解决方案,可以更好地理解、优化和开发各种应用的材料。然而,实施这些模型也面临着一些挑战。除了常见的训练数据不足和可解释性有限的问题以外,准确注释和标记材料图像或视频数据是一个突出的问题。目前,手动注释材料数据的过程耗时、主观且容易出错。因此,开发高效可靠的数据注释方法是一个持续的研究挑战。此外,航空材料的研究涉及广泛且复杂的非同质材料,因此开发能够泛化到多种材料或成像条件,并实现在不同材料系统或实验装置之间迁移的通用计算机视觉模型仍然具有挑战性。

### 1.3.3 自然语言处理模型

自然语言处理(NLP)是人工智能和语言学的子领域,旨在让计算机能够理解人类语言的句子和单词,并执行有用的任务。近年来,NLP模型的能力取得令人兴奋的进步,并在各个领域找到越来越有价值的应用。在学术文章中,NLP可用于如文本摘要、主题建模、机器翻译、语音识别、旅游语言化、词性标记、语法纠错、学术引文网络分析、命名实体链接、文本到文本和文本到图像生成等。据估计,网络上有超过1亿篇学术文章。其中,材料科学文献中包含了大量有价值的航空材料信息,但从庞大的文献库中进行特定的科学查询是一项艰巨的任务。NLP模型可以将与航空材料相关的文本分类为特定的类别或主题,帮助组织和检索信息,并通过自动提取相关信息来辅助挖掘材料特性、合成方法、表征技术和性能参数等数据<sup>[53]</sup>。命名实体识别(NER)技术可以从文本中识别和提取特定实体,如材料名称、化合物或设备名称,并通过实体链接技术与相关数据库建立联系,使研究人员能够访问更多具有更高相关程度的信息,促进信息交叉和知识整合<sup>[54-55]</sup>。此外,NLP模型还可以通过识别现有文献中的航空材料研究相关性和差异,以及新材料发展的趋势,为航空材料相关的创新提供见解。NLP模型还可用于开发问答系统或聊天机器人,通过理解用户的查询来提供准确的答案或建议,甚至在庞大的文献数量和复杂的材料相互关系中揭示隐藏的见解,帮助研究人员作航空材料研究中的关键决策。随着NLP模型的不断发展和复杂化,它们在航空领域中的应用势必会进一步扩展。从自动化的材料发现和性能预测到个性化的研究

协助和科学交流, NLP 具有显著加速革命性材料的开发和应用的潜力。

NLP 模型能够高效地检索信息、发现知识并自动完成各种任务, 从而推动航空材料研发的进步。然而, 在材料科学领域中, NLP 模型仍面临一些挑战。首先, 航空材料研究涉及通用 NLP 模型不熟悉的复杂专业术语, 如化学名称、方法和仪器技术等。这种不匹配导致模型难以准确解释文本和提取相关信息。其次, 科学描述常常依赖具有微妙差异的用词和歧义短语, 模型任何细微的误解都可能导致不准确的结果输出。而大量注释良好的材料科学数据往往稀缺且获取成本高昂, 这同样为 NLP 模型的准确性带来挑战。另外, NLP 模型所使用的数据集并非通过统一的实验流程或严谨的材料计算获得, 因此数据的一致性是不可控的。考虑到 NLP 模型的黑匣子性质, 科学家很难理解和信任该模型的预测数据和结论。这也增加了 NLP 模型辅助解决材料学问题的挑战, 从而阻碍了 NLP 模型的进一步开发和改进。

#### 1.4 机器学习的插值与外推

由于机器学习模型具有强大的数据拟合与预测能力, 因此在材料科学中扮演着重要角色。机器学习模型的能力主要通过两个过程来实现, 即插值和外推。这两个过程之间的差异对模型的适用性和预测的可靠性具有重要影响。插值是指模型在训练数据范围内进行数据预测的过程。在航空材料研究中, 插值非常关键, 因为研究人员经常需要了解材料在一定数据范围内的性能或行为演化过程。与传统的实验或理论计算方法相比, 机器学习可以根据现有的材料数据进行快速高效的插值运算, 从而大大缩短材料研究所需的时间和经济成本。这是由于传统方法通常需要针对不同的材料进行实验或建立计算模型, 以获取相应的材料数据。而机器学习模型具有良好的灵活性和泛化能力, 可以适应不同类型和特征的材料数据, 如图像数据、高维矩阵数据和文本数据等, 通过迁移学习等方法分析其演化规律和关联性, 然后在小样本材料数据上进行插值预测。此外, 机器学习模型还可以自动筛选和提取相关性特征, 进行算法选择和参数优化, 快速找到最佳的非线性关系插值模型, 提高插值的准确性和效率。尽管机器学习模型在插值中具有许多优势, 但也需要注意其局限性和挑战。机器学习模型很大程度上依赖于训练数据的质量和代表性。如果训练数据存在错误、偏差或不一致, 模型的性能可能会受到影响。此外, 如果数

据集中不同类别或标签的样本数量差异很大, 导致样本不平衡, 可能会使机器学习模型更倾向于预测多数类别的材料数据, 而对少数类别的预测不准确。特别是当可用的训练数据可能不足以覆盖材料变化的全部范围时, 精确的插值会变得更加困难。因此, 在应用机器学习模型进行插值时, 需要结合相关领域知识, 合理选择模型, 并进行适当的验证和评估。

与插值相反, 外推是在模型训练数据范围之外进行预测的过程。这是一个更具挑战性的任务, 但是由于其可能帮助发现具有全新特性的新材料, 或者通过推理未探索的成分和结构来加速材料设计, 因此对于航空材料研究人员具有更大的吸引力。实现外推预测的基础是机器学习模型在处理具有复杂的非线性关系和相互作用的材料数据方面具有强大学习能力。与传统的数学拟合方法相比, 机器学习模型通过并行计算和分布式处理, 从大规模材料数据中学习并建立模型的模式, 能够更好地捕捉数据的动态性和演化趋势, 并准确地预测未来数据, 从而展现出了很大的潜力。然而, 使用机器学习模型进行材料数据外推的过程更适合在具有较小方差的数据分布范围内进行。这是由于机器学习模型的外推准确性面临许多挑战。首先, 当目标数据分布与训练数据分布显著不同时, 模型可能会遇到推理困难甚至无法正常输出等问题; 其次, 训练域之外的模型预测对于训练数据和模型参数极其敏感, 并且可能导致不可预知的行为。机器学习模型是基于材料未来行为与过去行为一致的假设, 然而在材料科学中, 存在一些具有独特性质或行为的新材料。预测这些材料的行为可能是具有挑战性的, 同时这种限制往往会阻碍模型对物质行为的深入理解。因此, 解决以上挑战和限制需要航空领域专业知识、仔细的模型选择、特征工程、数据扩充和模型验证技术的结合。在应用机器学习模型时, 特别是在训练数据之外进行推理或根据模型预测作出关键决策时, 航空材料研究人员需要意识到这些局限性。

## 2 机器学习在航空材料研究中的应用

机器学习方法在加速材料优化与开发方面受到高度关注, 特别是在航空材料领域显示出极大的潜力<sup>[56]</sup>。机器学习具有高效构建模型和自动优化的能力, 以达到满足属性要求的材料信息输出。对于多目标的平衡设计, 机器学习模型所具有的灵活

性和不确定性也展现出巨大潜力和有效性<sup>[57]</sup>。甚至对于航空材料的微观结构特征,也可应用深度学习<sup>[58]</sup>、文本挖掘<sup>[59]</sup>和人工神经网络<sup>[60]</sup>来揭示其物理机制。机器学习方法将成为高性能航空材料快速设计的有效支撑。

## 2.1 高温合金材料

航空发动机和其他航空部件在运行过程中会面临极端的高温 and 高压环境,传统的金属材料往往无法满足需求。高温合金的引入有效弥补了这一缺点,并为航空工业带来巨大的进步。高温合金具有优异的耐高温性能,能够在极端条件下保持结构的强度和稳定性,保证发动机运行效率、推力和燃料经济性。但随着航空科技的发展进步,发动机性能需求不断提高,对高温合金的可靠性和寿命也提出更高的要求。机器学习技术可以帮助改进合金成分和微观结构设计,以提高材料的抗氧化性能、耐蠕变性能和疲劳寿命。同时基于材料大数据探索新的合金体系和复合材料,以进一步提高高温合金的性能和可靠性。

根据合金基体金属的主要元素,高温合金可分为钴基、镍基、铁镍基和铁基等,其中镍基高温合金产量最大,应用也最为广泛<sup>[61]</sup>。对于镍基高温合金的多组分体系,不同成分对其抗氧化性的影响存在明显差异。Yun等<sup>[62]</sup>建立了在400~1150℃之间27种不同成分的Ni-Cr-W-Mo合金氧化增重数据

库,并利用贝叶斯神经网络技术预测合金的氧化性能,发现合金元素对氧化增重速率的影响遵循Cr、W和Mo的顺序。Taylor等<sup>[63]</sup>采用Arrhenius模型结合简单线性回归、有监督和无监督机器学习方法,分析包含镍铬合金、铁铬合金以及铝化物材料数据库,发现Ni、Cr、Al和Fe对高温合金氧化动力学影响作用最为明显。而Duan等<sup>[64]</sup>进一步建立了合金温度、时间、元素组成和抗氧化性间的耦合效应学习模型,并认为Ti、Cr和Al有助于合金抗氧化性的提升,而Mo和Nb则起到消极作用。Conduit等<sup>[65]</sup>开发出一种反向传播人工神经网络(BPANN)工具,通过同时优化11项性能参数来设计新的镍基高温合金,包括成本、密度、 $\gamma'$ 相含量等。更进一步的,Xu等<sup>[66]</sup>通过第一性原理计算、理论模型和相图计算筛选成分并使用机器学习进行外推预测,从200余万种成分组合中选出14种高屈服强度镍基合金成分并进行了实验验证。

机器学习算法也被应用于进行结构识别与性能预测,如图4<sup>[67-68]</sup>所示,以辅助发现及优化多种先进高温合金材料体系。Liu等<sup>[69]</sup>将机器学习与全局优化算法相结合,以寻找具有所需多性能的 $\gamma'$ 强化Co基高温合金的优化成分,并利用经典动力学理论和机器学习方法分析其析出相粗化的演变过程。Fatriansyah等<sup>[68]</sup>构建了具有原子特征和热物性的ANN模型,研究发现Ni对Fe-Ni基高温

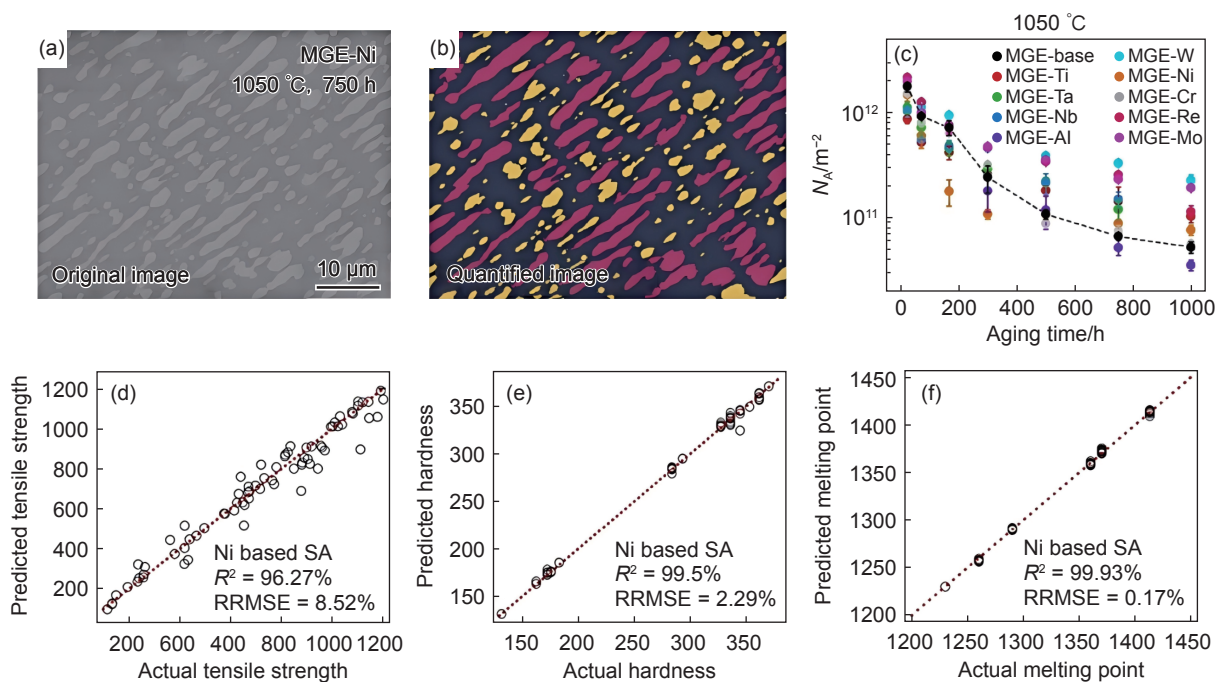


图4 机器学习用于镍基高温合金的结构识别(a)~(c)<sup>[67]</sup>与性能预测(d)~(f)<sup>[68]</sup>

Fig. 4 Machine learning is used for structure identification(a)-(c)<sup>[67]</sup> and performance prediction(d)-(f)<sup>[68]</sup> of nickel-based superalloys

合金的硬度和熔点的影响更大。在微观结构方面,刘芳宁等<sup>[70]</sup>使用多种回归模型预测高温合金中 $\gamma$ 相、 $\gamma'$ 相、 $\gamma''$ 相、 $\delta$ 相、Laves相和碳化物含量对合金室温、高温拉伸性能的影响,采用交叉验证的方式验证了模型的准确性。具有物理内核的机器学习模型在部分数据集上甚至表现出优于CALPHAD的准确性<sup>[71]</sup>。

## 2.2 高强结构材料

航空领域对于高强度结构材料的需求日益增加,这些材料在航空器的设计和制造中起着至关重要的作用。高强度结构材料需要具备优异的强度、轻量化特性、耐腐蚀性能和良好的加工性,以满足航空器在飞行过程中的可靠性要求。在航空领域中,常用的高强度结构材料包括铝合金、钛合金和超高强度钢等。

铝合金是航空领域中最常用的结构材料之一,其具有较低的密度和良好的可加工性,广泛应用于飞机机身、机翼和尾翼等部件的加工制造。目前已有相关研究使用机器学习对铝合金进行性能预测,

包括不同温度和时效时间下的硬度<sup>[72]</sup>、弯曲强度<sup>[73]</sup>、抗拉强度<sup>[74-75]</sup>和耐腐蚀性能<sup>[76]</sup>等。表1<sup>[72-79]</sup>给出多种机器学习模型及其预测精度,验证了机器学习技术在预测铝合金性能有效性,说明该方法能够高效地辅助高强度铝合金材料的研发。Jiang等<sup>[77]</sup>建立以性能为导向的设计策略机器学习设计系统(MLDS),探索具有高强度和韧性的新型铝合金,研究发现Mg和Zn合金元素生成高密度 $\eta'$ 相,会显著提升铝合金强度。Li等<sup>[80]</sup>提出基于Kriging模型的高效全局优化(EGO)算法,并使用其开发出一种950 MPa级7×××系合金。除此之外,机器学习还可以通过对性能演化趋势的预测,帮助解释铝合金的力学行为。Dorbane等<sup>[78]</sup>利用高斯过程回归(GPR)、神经网络(NN)和提升树(BST)三种机器学习模型预测25~300℃之间铝合金的应力-应变响应,并分析材料的塑性行为演化规律。Fernández等<sup>[81]</sup>也采用类似的方法,考虑弹性模量、屈服强度、极限抗拉强度和断后伸长率四种物性参数进行应力-应变曲线的预测。Freed<sup>[82]</sup>对比研究了随机

表1 用于铝合金性能预测机器学习模型及其预测精度<sup>[72-79]</sup>  
Table 1 Machine learning models for aluminum alloy performance prediction and its prediction accuracy<sup>[72-79]</sup>

Property	Prediction model	$R^2$	Property	Prediction model	$R^2$
Yield strength	GWO-ELM	0.9662	Stress-strain	BST	0.9986
	MGWO-ELM	0.9804		NN	0.9997
	ELM	0.3958		GPR	0.9997
	LR	0.71	Bending strength	CNN	0.9629
	KNN	0.723		RFR	0.9273
	ANN	0.92		ANN	0.9341
Tensile strength	C2P	0.93	Hardness	LSSVM-RVM	0.9126
	LSSVM-RVM	0.9712		ELM-RVM	0.8849
	ELM-RVM	0.9633		SVM-RVM	0.8979
	SVM-RVM	0.9584		LR	0.958
	GWO-ELM	0.9857		KNN	0.96
	MGWO-ELM	0.9805		CNN	0.9673
	ELM	0.7102		RFR	0.8821
	LR	0.914		ANN	0.9541
	KNN	0.947		SVM	0.93
	ANN	0.88		DT	0.9
	GRNN	0.9967		RF	0.95
	SVR	0.9828		GBT	0.94
	MLR	0.6823			

森林(RF)、高斯过程回归(GPR)、K最近邻(KNN)和核回归(KR)算法实现铝合金裂纹扩展预测,验证机器学习利用庞大的数据集辨别疲劳和裂纹扩展行为中复杂的模式和关系的可行性。

相比铝合金,钛合金具有更好的高温性能、更高的强度和刚度,适合承受高温和高压力环境,常被用于制造动力系统零部件、供氧系统、降落装置等。机器学习方法同样适用于高性能钛合金的设计优化。Zhu等<sup>[83]</sup>和Zou等<sup>[84]</sup>将高通量的实验方法、第一性原理计算与机器学习相结合获得具有优异力学性能的新型近 $\beta$ 钛合金。Xiong等<sup>[85]</sup>提出DFT计算结果结合机器学习方法的研究流程,帮助识别与稳定性和杨氏模量密切相关的关键合金参数,加速低模量二元Ti合金的研发。机器学习在提升材料疲劳寿命<sup>[86-87]</sup>、断裂韧性<sup>[88]</sup>、疲劳裂纹扩展<sup>[89-91]</sup>和疲劳蠕变损伤评估<sup>[92-93]</sup>的预测精度和效率方面具有优越性,因此在疲劳领域得到广泛应用。Zhan等<sup>[94]</sup>提出基于损伤力学的疲劳模型和随机森林模型,用于增材制造钛合金在循环载荷作用下的疲劳损伤分析和寿命预测。更进一步,Bao等<sup>[95]</sup>基于支持向量回归模型和高分辨同步加速器X射线显微断层扫描数据,发现缺陷的形貌、尺寸和位置对于钛合金高周疲劳寿命的影响作用依次递增。而针对泛化问题,Li等<sup>[96]</sup>利用蒙特卡罗模拟(MCs)放大数据集规模,提出利用人工神经网络模型研究缺陷尺寸、深度、位置和构建方向对钛合金的高周疲劳寿命影响。Zhu等<sup>[97]</sup>则在现有大量实验数据的基础上,引入一种名为Auto\_Gluo的多算法集成ML方法改进高周疲劳预测模型,可以准确预测TC17在不同工况下的S-N曲线,发现弹性应力集中系数和位置对钛合金的高周疲劳寿命影响较大。

超高强度钢现在已发展成为应用范围很广的一类重要钢种,其具有超强的抗拉强度、优异的韧性和塑性,已经大量应用于火箭发动机外壳、主轴承和飞机起落架等高速飞行器和大型飞机领域。Shen等<sup>[98]</sup>开发了一种结合物理冶金(PM)引导的机器学习和遗传算法(GA)的新材料设计方法,仅使用从文献中提取的小型数据库实现超高强度钢的设计。Zhan等<sup>[99]</sup>基于连续损伤力学(CDM)理论和人工神经网络模型,对激光熔覆AM 300M-AerMet100钢的疲劳性能进行预测,发现模型神经元数量的增加可以提升其预测精度。超高强度钢性能很大程度上取决于各相的类型和分布。因此,相的类型和数量的识别对于超高强度钢结构-性能

关系的建立至关重要。Zhu等<sup>[100]</sup>利用经过训练的VGG-16提取结构特征,并训练FCNN、SVM、KNN和RF模型对特征向量进行分类,从而获得超高强度钢的微观结构。He等<sup>[101]</sup>针对超高强度钢中存在的缺陷和夹杂物,利用ANN、SVR和RF三种模型预测疲劳寿命,其中RF模型展现出最佳的预测准确性。

### 2.3 热防护涂层

热防护在航空工业中扮演着至关重要的角色。随着航空技术不断发展和航空器性能的提升,航空器在高速飞行时受到的温度影响也越来越严重。热障涂层应用的意义在于针对航空发动机的高温部件进行保护,以延缓部件失效并防止飞行故障。从YSZ涂层等代表性航空涂层广泛应用可以推断出先进热障涂层在航空领域的巨大需求。机器学习辅助热障涂层的设计、预测和工艺优化已经成为现阶段研究热点,目的是使发动机可以承受更高的进气温度,并且实现热效率、可靠性和耐用性的提升。

将机器学习应用于热障涂层设计和性能预测似乎是可以预见的结果。Xu等<sup>[102]</sup>采用高斯混合模型(GMM)和支持向量回归(SVR)构建了YSZ涂层结合强度与大气等离子喷涂(APS)工艺参数的机器学习模型,得到理论上超过原始数据集最大黏结强度的优化工艺参数。而Zhu等<sup>[103]</sup>通过反向传播(BP)和极限学习机(ELM)算法研究YSZ涂层的工艺参数、微观组织特征和力学性能之间的定量关系,进一步为热障涂层的制备提供科学指导。Liu等<sup>[104]</sup>从文献中挖掘大量YSZ热障涂层的导热系数(TC)实验数据,实现了6%~8%(质量分数)YSZ涂层热导率的预测,认为梯度提升回归(GBR)模型在准确率和效率上达到较好的平衡。除了常用的YSZ材料外,机器学习也逐渐在更前沿的热障涂层材料设计中表现出优势。Zhu等<sup>[105]</sup>利用遗传算法(GA)优化的支持向量回归(SVR)模型预测成分掺杂对稀土钽酸盐涂层导热系数和热膨胀系数的影响,发现降低涂层导热系数的同时增加其热膨胀率的成分优化准则。

使用喷涂技术制备热障涂层往往具有独特而复杂的形貌,熔融颗粒连续堆积导致层状微观结构以及裂纹、气孔和未熔化颗粒等内部缺陷,会对涂层的性能与失效行为产生很大的影响。无论是通过调整加工参数获得理想的微观结构,还是根据其微观结构预测材料特性,将机器学习技术用于定量表征和分析涂层的微观结构势在必行,如图5<sup>[106-109]</sup>

所示。Ailsworth 等<sup>[106]</sup> 结合局部阈值的图像分析技术和卷积神经网络(CNN)模型实现二元语义分割,并将其应用于光学显微镜下涂层微观结构的识别中。Shan 等<sup>[107]</sup> 构建了深度卷积神经网络(DCNN)模型对标注的 SEM 图片进行训练,在小样本数据上实现对涂层缺陷的图像识别与分类。太赫兹时域光谱 (THz-TDS) 技术作为一种非接触式、高分辨率的无损检测方法,将其与机器学习结合获得了实现热障涂层微观结构的表征和评估的方法,显示出巨大的潜力并得到研究人员的关注。Sun 等<sup>[110]</sup> 提出了一种由太赫兹信号理论模型驱动

的长短期记忆(LSTM)框架,用于自动定位峰值和消除定位误差,从而消除折射率变化对涂层厚度测量的影响。Yuan 等<sup>[111]</sup> 设计了一种极限学习机(ELM)结合太赫兹时域光谱技术的混合机器学习模型来建立热障涂层厚度预测模型,并选择遗传算法(GA)对模型进行优化。针对热障涂层中热生长氧化物(TGO)厚度的问题, Li 等<sup>[112]</sup> 通过多尺度分析 MSA 方法提取小波特征参数并用于机器学习模型的训练,采用多线性回归和深度极限学习机(DELM)分析其与 TGO 厚度的相关性,两种方法都表现出较好预测精度。

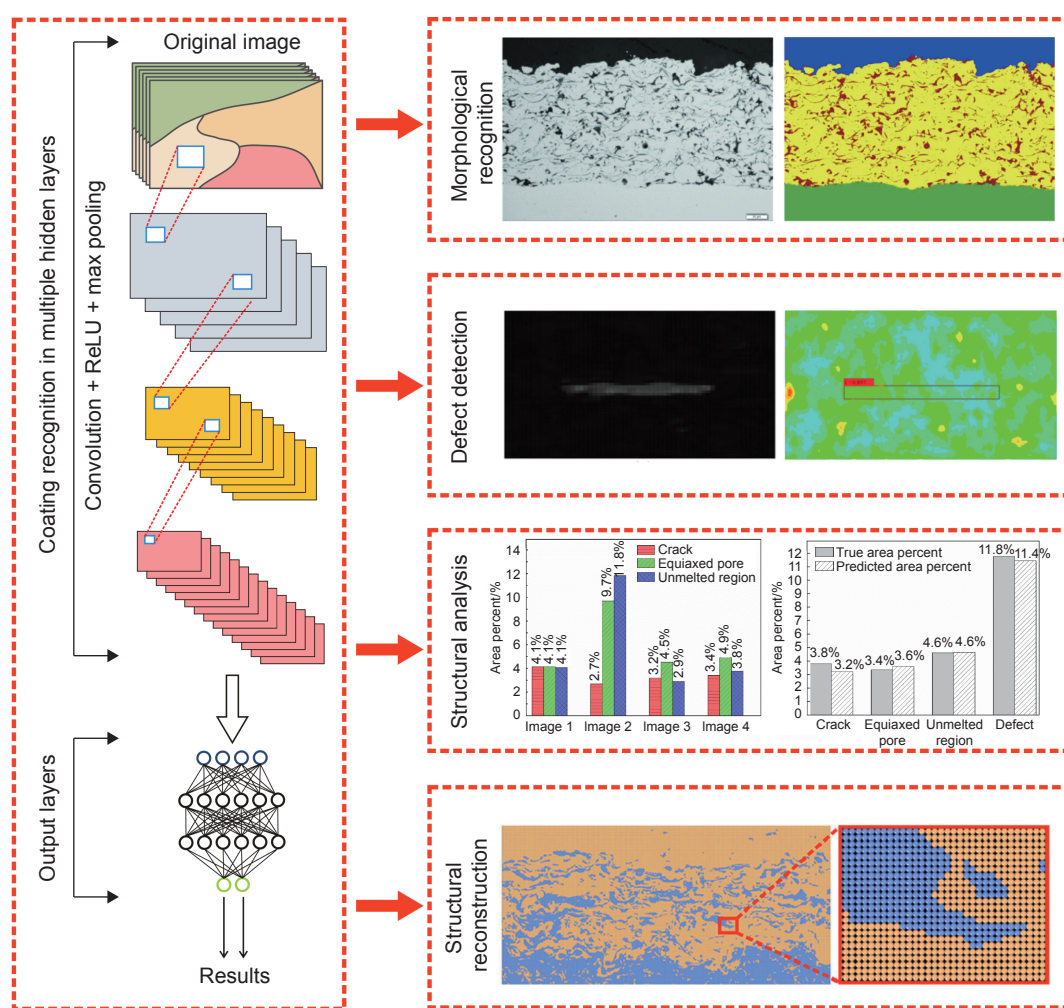


图5 基于图像数据的机器学习方法在热障涂层中的应用<sup>[106-109]</sup>

Fig. 5 Application of machine learning method based on image data in thermal barrier coating<sup>[106-109]</sup>

近年来,机器学习技术在热障涂层损伤和寿命预测方面也得到广泛研究和应用,并用于处理复杂的工程问题。特别是在多变量影响和多模式耦合情况下,机器学习技术能够提供准确的预测和分析,并显示出巨大的潜力。Sprague 等<sup>[113]</sup> 使用三维 X 射线显微成像方法获取图像数据,并使用 Unet 模型自动检测热处理热障涂层的陶瓷层和 TGO 界面

中的裂纹。Liu 等<sup>[114]</sup> 提出考虑微观结构和多物理场机理的涡轮叶片热障涂层寿命模型,建立涂层损伤与温度、热应变和时间的关系,实现 TGO 厚度与损伤系数的预测。Shi 等<sup>[108]</sup> 提出一种基于多尺度增强 Faster R-CNN 的无损评价技术,通过定位裂纹区域并识别裂纹尺度,实现涂层寿命估算。Gao 等<sup>[115]</sup> 根据试样不同次数热振动实验后的 TGO 厚

度,将结果分类为安全、临界、破损三类,并使用机器学习算法进行剩余寿命预测。通过机器学习技术的应用,可以更准确地识别关键特征、分类损伤、预测寿命。未来,随着数据和算法的不断发展,机器学习技术在热障涂层领域的应用将进一步拓展,并为航空领域带来更多的创新和更大的进步。

#### 2.4 功能与智能材料

随着科技的不断进步和航空领域的快速发展,先进功能和智能材料在航空应用中的重要性日益凸显。这类材料通过对外部压力、温度、应力、电场、磁场、光照和 pH 值等刺激响应,实现了环境感知和自适应调整的能力,以赋予飞机新的功能或改善现有功能。在航空领域,先进功能和智能材料的应用已取得显著的成果。例如,利用形状记忆合金作为驱动器来控制特定结构的变形,可以改变飞行器的气动性能<sup>[116]</sup>。压电材料作为传感器和驱动器可以将机械能转换为电能,用于结构的健康监测和振动噪声控制<sup>[117]</sup>。智能材料在制造耐高温轻量化结构件、传感器、电磁干扰屏蔽和振动控制装置等方面具有巨大潜力,可以提高飞行器的性能和安全性。因此,将机器学习技术应用于加速功能和智能材料设计可以更好地理解和优化材料性能,从而推动航空领域的技术进步。

机器学习在形状记忆合金(SMA)研发中的设计、相变行为建模和控制策略优化等方面提供了新的思路和方法。Lenzen等<sup>[118]</sup>提出了一种基于ANN的超弹性SMA导线热力学参数识别方法,不需要特定的仪器和基于专业知识的数据处理即可实现准确的响应计算。针对SMA合金在高温环境应用需求,Kankanamge等<sup>[119]</sup>使用多模态的机器学习模型帮助分析NiTiHf合金成分依赖性,发现马氏体转变温度和热滞后对Ni含量更敏感,而输出能量密度对Ti和Hf含量更敏感。Zhao等<sup>[120]</sup>提出一种将机器学习(ML)与理论计算紧密耦合的自适应设计策略,加速具有高弹性热效应的多组分铜铝基形状记忆合金(SMA)的发现过程,在50万种成分的势空间中发现最高熵变可达到1.88 J/mol K的成分组合。采用类似的研究方式,Treherm等<sup>[121]</sup>使用基于人工智能材料选择(AIMS)框架的材料信息学策略,寻找一种在50 MPa或更高应力下具有最小相变范围和至少1.5%应变幅值的形状记忆合金。

铁磁材料不仅作为电动机和发电机的核心部件被广泛使用,而且可以用于制造磁力计、磁性液位计等航空测量和传感器设备,以及作为降低电磁

辐射对飞行器和设备干扰的电磁屏蔽罩材料,提高飞行安全性和系统可靠性。借助良好的材料描述符,机器学习算法能够加速铁磁材料的设计并揭示潜在的机制。He等<sup>[122]</sup>从具有46个描述符的自建立特征池中获得三个通用描述符,包括Matyionov-Batsanov电负性、价电子数与标称电荷的比值以及核心电子距离(Schubert),并使用机器学习方法预测材料相共存态。Long等<sup>[123]</sup>使用随机森林算法对铁磁和反铁磁化合物进行分类,并进一步预测铁磁化合物的居里温度。模型的分类准确率优于DFT计算,而且可以实现磁化强度的高效评估,从而加速铁磁材料的筛选。Xin等<sup>[124]</sup>基于二维材料数据库,结合高通量DFT计算,建立机器学习分类和回归模型分别用于材料筛选和净磁矩预测,并通过沙普利可加性解释(Shapley additive explanations, SHAP)分析来评估回归模型的可解释性,从而发现Cr<sub>2</sub>NF<sub>2</sub>是一种潜在的反铁磁铁电二维多铁材料,这也证明机器学习具有加速强磁性铁磁材料发现的潜力。

压电材料(PZT)在航空领域的应用取得显著成效,包括提升机翼的空气动力学特性、监测航空器结构健康度、用于智能飞机部件、为无人机和微型飞行器提供动力以及在飞机的推进系统中用于精确喷射燃料等。Sapkal等<sup>[125]</sup>开发了一个机器学习模型预测压电陶瓷材料功能特性,筛选并确定最重要描述符为元素的电负性、原子尺寸、化合物的化学计量和A/B位点元素的极化。Li等<sup>[126]</sup>采用机器学习方法对多种填料组成的压电纳米复合材料的性能进行建模,研究填料性质和体积分数对材料压电和力学性能的作用,并实现对聚合物/陶瓷纳米复合材料的有效应力传递效率、有效介电常数和压电系数的预测。Yuan等<sup>[127]</sup>提出一个结合特征工程、机器学习、实验设计和合成的数据驱动框架,以优化BaTiO<sub>3</sub>基陶瓷的压电常数并获得压电常数约为430 pC/N的成分组合。Xue等<sup>[128]</sup>开发出一种用于压电材料设计的贝叶斯方法,使用实验相图和铁电相变的Landau-Devonshire理论,结合推理模型预测成分,提升BaTiO<sub>3</sub>基压电材料的温度可靠性。机器学习推动功能和智能材料发展可以进一步加速航空技术的进步,为飞行器的设计和制造带来更多可能性。

### 3 结论与展望

随着人工智能的不断发展,机器学习技术在航

空领域的应用将为航空产业带来更多的创新和突破。本次工作主要关注机器学习驱动航空材料开发和优化的研究现状,对机器学习的类型、算法特征和其与材料学研究的结合方式进行总结,并系统论述机器学习算法在高温合金材料、高强度结构材料、热防护涂层材料、功能与智能材料研究中的应用。虽然目前机器学习正在被越来越多地用于航空材料研究中,但是依然存在大量的问题,需要从数据来源、模型性能和学习方式三个角度进行阐述和解决。

(1)在数据来源问题上,目前材料科学,特别是航空材料领域的实验数据积累往往非常昂贵和耗时,由此所导致的数据稀缺性限制了机器学习模型的应用。同时,不同来源的材料数据往往存在实验条件、测量方法或数据处理技术的差异,会导致一致性不佳的问题,这会对模型的准确性和可靠性产生负面影响;并且由于实验设计或数据收集方法的局限性,数据也可能存在偏差或者样本不均衡的问题,从而影响模型的泛化能力;此外,某些数据可能受到保密条款或专利权的限制而无法公开,这也限制了数据的可用性,对于构建广泛适用的机器学习模型产生挑战。

针对这些问题,推进机器学习在航空材料领域的发展需要进一步推动数据的共享。首先可以通过建立具备数据存储、管理、分析、服务等功能的数据共享平台,涵盖航空材料领域的主要数据类型、数据特征和数据应用场景。同时,根据航空材料的特点和需求,建立统一的结构标准和编码规范,确保相关数据的一致性与可用性,供研究人员、学术机构和企业分享和使用。同时,建立健全的数据访问权限控制和使用审计机制,用于在数据共享的框架下进行权衡,以确保数据安全和解决部分数据隐私与保密性需求。此外,为了解决由于昂贵的通信代价和数据泄漏风险所导致的“数据孤岛”问题,可以发展基于区块链的航空材料联邦学习框架。该框架将允许数据持有者在本地训练模型,只共享模型参数或梯度而非原始数据,而且数据传输和参数交换过程可以通过去中心化和共识机制来保障数据安全。区块链的去中心化特点可以确保模型数据的公开透明和不可篡改性。共识机制(如PoW, PoS等)可以用于验证各个参与节点的计算和传输的正确性,可以帮助不同的材料研究机构 and 航空相关企业在无需完全信任对方的情况下,共同参与联邦学习。这种方式可以在一定程度上解决数据共享的存储和管理问题,在保护数据隐私

的前提下共享模型成果,推动整体技术进步。

(2)机器学习模型存在缺乏航空材料领域知识或已知的物理洞察力,同时也伴随着预测模型的可解释性较差的问题。材料科学是一个复杂而多样化的领域,涉及材料的特性、结构、合成方法等多个方面。相关知识的缺乏会使机器学习模型可能无法准确选择与材料性质相关的重要特征。此外,通过学习大量数据来进行预测的方式,并没有直接利用相关的物理和化学理论,这可能导致模型无法解释预测结果与材料物化特性之间的关系。机器学习模型具有复杂的多层结构和大量参数,其内部工作机制往往被视为黑盒子,难以理解其决策过程,加之无严谨的物理推导过程,这无疑造成可解释性的缺失以及可靠性的问题,得出的结果也难以被研究人员所信任。

因此,机器学习技术在航空材料领域的未来发展需要超越纯粹的数据驱动方法,将领域知识和物理洞察力深度融合到机器学习模型的开发过程中。这种整合不仅能提高模型在筛选材料特征时的精确性,还能增强其对材料的物理和化学特性的理解和解释能力。通过将材料科学的基础理论和实验数据引入到机器学习模型中,例如将相关的材料失效准则进行预处理和特征选择,可以在模型的早期设计阶段奠定一定的断裂行为判定基础,使模型不仅能从大数据中学习,还能依据已知的科学规律进行推理和验证。这种方法有助于构建更可靠、更具解释性的模型,推动航空材料科学的发展。此外,为更好地服务航空材料的研究和应用,开发新的模型解释技术同样至关重要。解释技术需要结合可视化工具和解释性算法,如热图、决策树、部分依赖图和SHAP值等,深入分析和展示模型的决策过程。这样不仅有助于验证模型的可靠性和准确性,还能直观展示模型如何利用不同输入特征进行决策,帮助研究人员和工程专家理解并利用模型的预测结果,对于揭示不同材料特征间的复杂关系提供有价值的见解。通过将领域知识、模型解释技术与数据驱动方法深度融合,航空材料机器学习模型在准确预测和解释材料的行为和性能方面展现出更大的潜力,为新航空材料的设计和开发提供有力支持。

(3)虽然机器学习模型为分析材料数据提供了自动化且高效的解决方案,能够更好地优化和开发多种应用背景下的航空材料,但是材料的性能受到众多因素的影响,包括成分、工艺参数、微观结构和服役条件等。这些因素之间的相互作用机制非

常复杂,使得构建准确的机器学习模型变得困难。而且受限于材料检测技术的差异,不同的材料特性信息往往需要通过不同的表征方法和过程获得,这就造成机器学习模型需要根据不同的数据格式和数据密度,提取特征信息并完成预测。现阶段常用的机器学习算法在处理不同数据类型时,会存在明显的性能差异,需要研究人员自行比较并选择合适的算法进行使用。这种应用方式无疑会限制机器学习的适用性,特别是在进行多因素耦合条件下材料服役性能的评估方面。单一的算法架构难以应对差异化的数据输入,必然造成输出准确性的降低。

为了提高在航空材料研究中机器学习模型的学习能力,使用特征提取、特征选择和特征组合等方法将不同类型的数据转换为一致的特征形式,已成为一个重要的发展方向。这类方法不仅有助于将多源数据转化为模型可以处理的统一格式,还能使模型在高维空间中实现材料信息的高效学习。多模态模型能够综合处理多种形式的材料数据,例如包含材料结构的图像数据、实验条件的文本信息数据以及实验测试数据和模拟数据等,这在复杂应用场景中尤为重要。开发适用于航空材料领域的多模态机器学习模型,能够显著提高材料数据的利用率,实现对航空材料特性更全面和准确的分析与预测。同时,数据融合技术的发展在解决航空材料数据问题上也具有显著优势。其不仅可以处理数据格式和类型的异构问题,还能实时对齐或配准材料测试数据和计算机模拟数据,从而实现基于时效性的数据动态融合。例如通过材料蠕变实验数据和应力分布模拟数据的动态融合,可以实时更新模型对材料蠕变行为的预测,从而提高模型输出准确性。数据融合技术可以帮助建立更加全面的材料特性数据库,在提供丰富训练数据的同时提升模型的泛化能力和预测精度。通过以上方法,机器学习模型在处理航空材料数据时能够更加有效地进行多源数据整合和利用,推动航空材料科学的进一步发展。

机器学习技术在航空材料领域的应用潜力巨大。通过持续的研究和创新,能够利用机器学习技术提高航空材料的开发效率,并优化其性能、可靠性和可持续性。这种研究方式需要融合材料科学、数据科学、计算机科学和人工智能,是一个跨学科领域,需要航空材料和计算机领域的专家共同合作。基于机器学习的航空材料研发作为一种新的研究范式,将进一步推动航空工程的发展,为未来

的航空科技提供更安全、高效的解决方案。

#### 参考文献:

- [1] MITTAL S, SANGWAN O P. Big data analytics using machine learning techniques[C]//2019 9th International Conference on Cloud Computing, Data Science & Engineering. New York: IEEE, 2019: 203-207.
- [2] SRIDHAR B. Applications of machine learning techniques to aviation operations: promises and challenges [C]//2020 International Conference on Artificial Intelligence and Data Analytics for Air Transportation. New York: IEEE, 2020: 1-12.
- [3] BRUNTON S L, NATHAN K J, MANOHAR K, et al. Data-driven aerospace engineering: reframing the industry with machine learning[J]. AIAA Journal, 2021, 59(8): 2820-2847.
- [4] 车畅畅, 王华伟, 倪晓梅, 等. 基于 1D-CNN 和 Bi-LSTM 的航空发动机剩余寿命预测[J]. 机械工程学报, 2021, 57(14): 304-312.  
CHE C C, WANG H W, NI X M, et al. Residual life prediction of aeroengine based on 1D-CNN and Bi-LSTM[J]. Journal of Mechanical Engineering, 2021, 57(14): 304-312.
- [5] 裴洪, 胡昌华, 司小胜, 等. 基于机器学习的设备剩余寿命预测方法综述[J]. 机械工程学报, 2019, 55(8): 1-13.  
PEI H, HU C H, SI X S, et al. Review of machine learning based remaining useful life prediction methods for equipment[J]. Journal of Mechanical Engineering, 2019, 55(8): 1-13.
- [6] 安芳利, 李立敏. 航空制造企业智能制造技术[J]. 机械与电子控制工程, 2022, 4(2): 20-21.  
AN F L, LI L M. Intelligent manufacturing technologies in aviation manufacturing enterprises[J]. Mechanical and Electronic Control Engineering, 2022, 4(2): 20-21.
- [7] 张可云, 仲艾芬. 我国制造业结对集聚水平测度及其特征——机器学习方法的改进与应用[J]. 经济地理, 2023, 43(4): 124-133.  
ZHANG K Y, ZHONG A F. Measurement and characteristic of manufacturing co-agglomeration in China: improvement and application of machine learning[J]. Economic Geography, 2023, 43(4): 124-133.
- [8] 包建文, 钟翔屿, 张代军, 等. 国产高强中模碳纤维及其增强高韧性树脂基复合材料研究进展[J]. 材料工程, 2020, 48(8): 33-48.  
BAO J W, ZHONG X Y, ZHANG D J, et al. Progress in high strength intermediate modulus carbon fiber and its high toughness resin matrix composites in China[J]. Journal of Materials Engineering, 2020, 48(8): 33-48.

- [9] 邢丽英, 冯志海, 包建文, 等. 碳纤维及树脂基复合材料产业发展面临的机遇与挑战[J]. 复合材料学报, 2020, 37(11): 2700-2706.  
XING L Y, FENG Z H, BAO J W, et al. Facing opportunity and challenge of carbon fiber and polymer matrix composites industry development[J]. Acta Materiae Compositae Sinica, 2020, 37(11): 2700-2706.
- [10] 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.
- [11] WANG X, GAO X, ZHANG Z, et al. Advances in modifications and high-temperature applications of silicon carbide ceramic matrix composites in aerospace: a focused review[J]. Journal of the European Ceramic Society, 2021, 41(9): 4671-4688.
- [12] KARKUN M S, DHARMALINGAM S. 3D printing technology in aerospace industry—a review[J]. International Journal of Aviation, Aeronautics, and Aerospace, 2022, 9(2): 4.
- [13] 金东海, 梁栋, 刘晓恒, 等. 航空发动机整机周向平均稳态仿真方法[J]. 航空动力学报, 2022, 37(11): 2598-2616.  
JING D H, LIANG D, LIU X H, et al. Steady state simulation method of whole aero-engine based on circumferentially averaged method[J]. Journal of Aerospace Power, 2022, 37(11): 2598-2616.
- [14] 马芳, 刘璐. 航空轴承技术现状与发展[J]. 航空发动机, 2018, 44(1): 85-90.  
MA F, LIU L. Present situation and development of aviation bearing technology[J]. Aeroengine, 2018, 44(1): 85-90.
- [15] 吴炜, 孙强. 应用机器学习加速新材料的研发[J]. 中国科学: 物理学 力学 天文学, 2018, 48(10): 58-70.  
WU W, SUN Q. Applying machine learning to accelerate new materials development[J]. Scientia Sinica Physica, Mechanica & Astronomica, 2018, 48(10): 58-70.
- [16] SALIYA K, PANICAUD B, LABERGÈRE C. Advanced modeling and numerical simulations for the thermo-chemico-mechanical behaviour of materials with damage and hydrogen, based on the thermodynamics of irreversible processes[J]. Finite Elements in Analysis and Design, 2019, 164: 79-97.
- [17] 米晓希, 汤爱涛, 朱雨晨, 等. 机器学习技术在材料科学领域中的应用进展[J]. 材料导报, 2021, 35(15): 15115-15124.  
MI X X, TANG A T, ZHU Y C, et al. Research progress of machine learning in material science[J]. Materials Reports, 2021, 35(15): 15115-15124.
- [18] HOLM E A, COHN R, GAO N, et al. Overview: computer vision and machine learning for microstructural characterization and analysis[J]. Metallurgical and Materials Transactions A, 2020, 51(12): 5985-5999.
- [19] MA W, KAUTZ E J, BASKARAN A, et al. Image-driven discriminative and generative machine learning algorithms for establishing microstructure-processing relationships[J]. Journal of Applied Physics, 2020, 128(13): 134901.
- [20] 王炯, 肖斌, 刘轶. 机器学习辅助的高通量实验加速硬质高熵合金  $\text{Co}_x\text{Cr}_y\text{Ti}_z\text{Mo}_u\text{W}_v$  成分设计[J]. 中国材料进展, 2020, 39(4): 269-277.  
WANG J, XIAO B, LIU Y. Machine learning assisted high-throughput experiments accelerates the composition design of hard high-entropy alloy  $\text{Co}_x\text{Cr}_y\text{Ti}_z\text{Mo}_u\text{W}_v$ [J]. Materials China, 2020, 39(4): 269-277.
- [21] LI J, XIE B, FANG Q, et al. High-throughput simulation combined machine learning search for optimum elemental composition in medium entropy alloy[J]. Journal of Materials Science & Technology, 2021, 68: 70-75.
- [22] ZHANG H, FU H, ZHU S, et al. Machine learning assisted composition effective design for precipitation strengthened copper alloys[J]. Acta Materialia, 2021, 215: 117118.
- [23] LIU Y, NIU C, WANG Z, et al. Machine learning in materials genome initiative: a review[J]. Journal of Materials Science & Technology, 2020, 57: 113-122.
- [24] MAZHNIK E, OGANOV A R. Application of machine learning methods for predicting new superhard materials[J]. Journal of Applied Physics, 2020, 128(7): 075102.
- [25] 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.
- [26] XIONG J, ZHANG T, SHI S. Machine learning of mechanical properties of steels[J]. Science China Technological Sciences, 2020, 63(7): 1247-1255.
- [27] 曹枝军, 袁建辉, 苏怀宇, 等. 基于原位声发射信号的热障涂层三点弯曲失效模式的机器学习[J]. 硅酸盐学报, 2023, 51(2): 373-388.  
CAO Z J, YUAN J H, SU H Y, et al. Failure mode of thermal barrier coatings based on acoustic emission under three-point bending *via* machine learning based on *in-situ* acoustic emission signals[J]. Journal of the Chinese Ceramic Society, 2023, 51(2): 373-388.
- [28] ELEN A, BAŞ S, KÖZKURT C. An adaptive gaussian

- kernel for support vector machine[J]. *Arabian Journal for Science and Engineering*, 2022, 47(8): 10579-10588.
- [29] VELOSO De MELO V, BANZHAF W. Automatic feature engineering for regression models with machine learning: an evolutionary computation and statistics hybrid[J]. *Information Sciences*, 2018, 430/431: 287-313.
- [30] DAI D, XU T, WEI X, et al. Using machine learning and feature engineering to characterize limited material datasets of high-entropy alloys[J]. *Computational Materials Science*, 2020, 175: 109618.
- [31] DONG X, YU Z, CAO W, et al. A survey on ensemble learning[J]. *Frontiers of Computer Science*, 2020, 14(2): 241-258.
- [32] JANIESCH C, ZSCHECH P, HEINRICH K. Machine learning and deep learning[J]. *Electronic Markets*, 2021, 31(3): 685-695.
- [33] SHINDE P P, SHAH S. A review of machine learning and deep learning applications[C]//2018 Fourth International Conference on Computing Communication Control and Automation. Piscataway, New Jersey: IEEE, 2018: 1-6.
- [34] ALZUBI J, NAYYAR A, KUMAR A. Machine learning from theory to algorithms: an overview[J]. *Journal of Physics: Conference Series*, 2018, 1142(1): 012012.
- [35] ÇELİK Ö. A research on machine learning methods and its applications[J]. *Journal of Educational Technology and Online Learning*, 2018, 1(3): 25-40.
- [36] HOCHREITER S. The vanishing gradient problem during learning recurrent neural nets and problem solutions[J]. *International Journal of Uncertainty, Fuzziness and Knowledge-Based Systems*, 1998, 6(2): 107-116.
- [37] SUN Z, WANG G, LI P, et al. An improved random forest based on the classification accuracy and correlation measurement of decision trees[J]. *Expert Systems with Applications*, 2024, 237: 121549.
- [38] SAPIJASZKO G, MIKHAEL W B. An overview of recent convolutional neural network algorithms for image recognition[C]// 2018 IEEE 61st International Midwest Symposium on Circuits and Systems. New York: IEEE, 2018: 743-746.
- [39] THIYAGALINGAM J, SHANKAR M, FOX G, et al. Scientific machine learning benchmarks[J]. *Nature Reviews Physics*, 2022, 4(6): 413-420.
- [40] ZHAI X, YIN Y, PELLEGRINO J W, et al. Applying machine learning in science assessment: a systematic review[J]. *Studies in Science Education*, 2020, 56(1): 111-151.
- [41] LEI B, KIRK T Q, BHATTACHARYA A, et al. Bayesian optimization with adaptive surrogate models for automated experimental design[J]. *npj Computational Materials*, 2021, 7(1): 1-12.
- [42] DU X, XU H, ZHU F. Understanding the effect of hyperparameter optimization on machine learning models for structure design problems[J]. *Computer-Aided Design*, 2021, 135: 103013.
- [43] 夏杰桢, 曹蓉, 吴琪. 机器学习结合密度泛函理论计算在材料科学中的研究进展[J]. *化学通报*, 2022, 85(10): 1224-1232.
- XIA J Z, CAO R, WU Q. Research progress of machine learning combined with DFT calculation in materials science[J]. *Chemistry*, 2022, 85(10): 1224-1232.
- [44] SHEN Z H, LIU H X, SHEN Y, et al. Machine learning in energy storage materials[J]. *Interdisciplinary Materials*, 2022, 1(2): 175-195.
- [45] ANSTINE D M, ISAYEV O. Machine learning interatomic potentials and long-range physics[J]. *The Journal of Physical Chemistry A*, 2023, 127(11): 2417-2431.
- [46] MISHIN Y. Machine-learning interatomic potentials for materials science[J]. *Acta Materialia*, 2021, 214: 116980.
- [47] CHITTAM S, GOKARAJU B, XU Z, et al. Big data mining and classification of intelligent material science data using machine learning[J]. *Applied Sciences*, 2021, 11(18): 8596.
- [48] FANG J, YANG S, XIE M, et al. Solid-liquid phase transition temperature prediction of alloys based on machine learning key feature screening[J]. *Applied Materials Today*, 2024, 36: 102007.
- [49] 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.
- XIE J X, SU Y J, XUE D Z, et al. Machine learning for materials research and development[J]. *Acta Metallurgica Sinica*, 2021, 57(11): 1343-1361.
- [50] TSUTSUI K, TERASAKI H, UTO K, et al. A methodology of steel microstructure recognition using SEM images by machine learning based on textural analysis[J]. *Materials Today Communications*, 2020, 25: 101514.
- [51] KUMAR R P, DEIVANATHAN R, JEGADEESHWARAN R. Welding defect identification with machine vision system using machine learning[J]. *Journal of Physics: Conference Series*, 2020, 1716(1): 012023.
- [52] CAGGIANO A, ZHANG J, ALFIERI V, et al. Machine learning-based image processing for on-line defect recognition in additive manufacturing[J]. *CIRP Annals*, 2019, 68(1): 451-454.
- [53] COURT C J, COLE J M. Magnetic and superconducting phase diagrams and transition temperatures pre-

- dicted using text mining and machine learning[J]. *npj Computational Materials*, 2020, 6(1): 18.
- [54] TREWARTHA A, WALKER N, HUO H, et al. Quantifying the advantage of domain-specific pre-training on named entity recognition tasks in materials science[J]. *Patterns*, 2022, 3(4): 100488.
- [55] WESTON L, TSHITROYAN V, DAGDELEN J, et al. Named entity recognition and normalization applied to large-scale information extraction from the materials science literature[J]. *Journal of Chemical Information and Modeling*, 2019, 59(9): 3692-3702.
- [56] XU B, YIN H, JIANG X, et al. Design of Ni-based turbine disc superalloys with improved yield strength using machine learning[J]. *Journal of Materials Science*, 2022, 57(22): 10379-10394.
- [57] CHEN Y, TIAN Y, ZHOU Y, et al. Machine learning assisted multi-objective optimization for materials processing parameters: a case study in Mg alloy[J]. *Journal of Alloys and Compounds*, 2020, 844: 156159.
- [58] FENG S, ZHOU H, DONG H. Using deep neural network with small dataset to predict material defects[J]. *Materials & Design*, 2019, 162: 300-310.
- [59] WANG W, JIANG X, TIAN S, et al. Automated pipeline for superalloy data by text mining[J]. *npj Computational Materials*, 2022, 8(1): 1-12.
- [60] NOWELL D, NOWELL P W. A machine learning approach to the prediction of fretting fatigue life[J]. *Tribology International*, 2020, 141: 105913.
- [61] 李忠群, 石晓芳, 王志康, 等. 航空高温合金材料切削加工研究现状与展望[J]. *制造技术与机床*, 2018(12): 55-60.
- LI Z Q, SHI X F, WANG Z K, et al. Research status and prospect on machining of aeronautical superalloy materials[J]. *Manufacturing Technology & Machine Tool*, 2018(12): 55-60.
- [62] YUN D W, SEO S M, JEONG H W, et al. Modelling high temperature oxidation behaviour of Ni-Cr-W-Mo alloys with Bayesian neural network[J]. *Journal of Alloys and Compounds*, 2014, 587: 105-112.
- [63] TAYLOR C D, TOSSEY B M. High temperature oxidation of corrosion resistant alloys from machine learning[J]. *npj Materials Degradation*, 2021, 5(1): 1-10.
- [64] DUAN X, XU H, WANG E, et al. Design of novel Ni-based superalloys with better oxidation resistance with the aid of machine learning[J]. *Journal of Materials Science*, 2023, 58(27): 11100-11114.
- [65] CONDUIT B D, JONES N G, STONE H J, et al. Design of a nickel-base superalloy using a neural network[J]. *Materials & Design*, 2017, 131: 358-365.
- [66] XU B, YIN H, JIANG X, et al. Data-driven design of Ni-based turbine disc superalloys to improve yield strength[J]. *Journal of Materials Science & Technology*, 2023, 155: 175-191.
- [67] LIU P, HUANG H, JIANG X, et al. Evolution analysis of  $\gamma'$  precipitate coarsening in Co-based superalloys using kinetic theory and machine learning[J]. *Acta Materialia*, 2022, 235: 118101.
- [68] FATRIANSYAH J F, SUHARIADI I, FAUZIYYAH H A, et al. Prediction and optimization of mechanical properties of Ni based and Fe-Ni based super alloys *via* neural network approach with alloying composition parameter[J]. *Journal of Materials Research and Technology*, 2023, 24: 4168-4176.
- [69] LIU P, HUANG H, ANTONOV S, et al. Machine learning assisted design of  $\gamma'$ -strengthened Co-base superalloys with multi-performance optimization[J]. *npj Computational Materials*, 2020, 6(1): 62.
- [70] 刘芳宁, 王越, 孙瑞侠. 针对高温合金微观组织-拉伸性能关系的机器学习预测模型[J]. *中国材料进展*, 2022, 41(11): 938-946.
- LIU F N, WANG Y, SUN R X. Machine learning prediction model for microstructure-tensile properties relationship of superalloys[J]. *Materials China*, 2022, 41(11): 938-946.
- [71] TAYLOR P L, CONDUIT G. Machine learning predictions of superalloy microstructure[J]. *Computational Materials Science*, 2022, 201: 110916.
- [72] YE X, SU Z, DAHARI M, et al. Hybrid modeling of mechanical properties and hardness of aluminum alloy 5083 and C100 copper with various machine learning algorithms in friction stir welding[J]. *Structures*, 2023, 55: 1250-1261.
- [73] ÖZKAVAK V H, İNCE M, BIÇAKLI E E. Prediction of mechanical properties of the 2024 aluminum alloy by using machine learning methods[J]. *Arabian Journal for Science and Engineering*, 2023, 48(3): 2841-2850.
- [74] DEVI M A, PRAKASH C P S, CHINNANNAVAR R P, et al. An informatic approach to predict the mechanical properties of aluminum alloys using machine learning techniques[C]//2020 International Conference on Smart Electronics and Communication. New York: IEEE, 2020: 536-541.
- [75] XIONG Z, LI J, ZHAO P, et al. Prediction of mechanical properties of aluminium alloy strip using the extreme learning machine model optimized by the gray wolf algorithm[J]. *Advances in Materials Science and Engineering*, 2023, 2023: e5952072.
- [76] CAO X, ZHANG Y, CHEN H. Predicting mechanical properties and corrosion resistance of heat-treated 7N01 aluminum alloy by machine learning methods[J]. *IOP*

- Conference Series: Materials Science and Engineering, 2020, 774(1): 012030.
- [77] JIANG L, WANG C, FU H, et al. Discovery of aluminum alloys with ultra-strength and high-toughness *via* a property-oriented design strategy[J]. Journal of Materials Science & Technology, 2022, 98: 33-43.
- [78] DORBANE A, HARROU F, ANGHEL D C, et al. Machine learning prediction of aluminum alloy stress-strain curves at variable temperatures with failure analysis[J]. Journal of Failure Analysis and Prevention, 2024(1): 023-01833-2.
- [79] CHAUDRY M U, HAMAD K, ABUHMED T. Machine learning-aided design of aluminum alloys with high performance[J]. Materials Today Communications, 2021, 26: 101897.
- [80] LI J, ZHANG Y, CAO X, et al. Accelerated discovery of high-strength aluminum alloys by machine learning [J]. Communications Materials, 2020, 1(1): 1-10.
- [81] FERNÁNDEZ M D, RODRÍGUEZ-PRIETO A, CAMACHO A M. Prediction of the bilinear stress-strain curve of aluminum alloys using artificial intelligence and big data[J]. Metals, 2020, 10(7): 904.
- [82] FREED Y. Machine learning-based predictions of crack growth rates in an aeronautical aluminum alloy[J]. Theoretical and Applied Fracture Mechanics, 2024, 130: 104278.
- [83] ZHU C, LI C, WU D, et al. A titanium alloys design method based on high-throughput experiments and machine learning[J]. Journal of Materials Research and Technology, 2021, 11: 2336-2353.
- [84] ZOU C, LI J, WANG W Y, et al. Integrating data mining and machine learning to discover high-strength ductile titanium alloys[J]. Acta Materialia, 2021, 202: 211-221.
- [85] XIONG S, LI X, WU X, et al. A combined machine learning and density functional theory study of binary Ti-Nb and Ti-Zr alloys: stability and Young's modulus [J]. Computational Materials Science, 2020, 184: 109830.
- [86] HE L, WANG Z, AKEBONO H, et al. Machine learning-based predictions of fatigue life and fatigue limit for steels[J]. Journal of Materials Science & Technology, 2021, 90: 9-19.
- [87] LIAN Z, LI M, LU W. Fatigue life prediction of aluminum alloy *via* knowledge-based machine learning [J]. International Journal of Fatigue, 2022, 157: 106716.
- [88] LIU X, ATHANASIOU C E, PADTURE N P, et al. A machine learning approach to fracture mechanics problems[J]. Acta Materialia, 2020, 190: 105-112.
- [89] HU D, SU X, LIU X, et al. Bayesian-based probabilistic fatigue crack growth evaluation combined with machine-learning-assisted GPR[J]. Engineering Fracture Mechanics, 2020, 229: 106933.
- [90] WANG L, ZHU S P, LUO C, et al. Physics-guided machine learning frameworks for fatigue life prediction of AM materials[J]. International Journal of Fatigue, 2023, 172: 107658.
- [91] MA X, HE X, TU Z C. Prediction of fatigue-crack growth with neural network-based increment learning scheme[J]. Engineering Fracture Mechanics, 2021, 241: 107402.
- [92] ZHANG X C, GONG J G, XUAN F Z. A deep learning based life prediction method for components under creep, fatigue and creep-fatigue conditions[J]. International Journal of Fatigue, 2021, 148: 106236.
- [93] GU H H, WANG R Z, ZHU S P, et al. Machine learning assisted probabilistic creep-fatigue damage assessment[J]. International Journal of Fatigue, 2022, 156: 106677.
- [94] ZHAN Z, HU W, MENG Q. Data-driven fatigue life prediction in additive manufactured titanium alloy: a damage mechanics based machine learning framework[J]. Engineering Fracture Mechanics, 2021, 252: 107850.
- [95] BAO H, WU S, WU Z, et al. A machine-learning fatigue life prediction approach of additively manufactured metals[J]. Engineering Fracture Mechanics, 2021, 242: 107508.
- [96] LI J, YANG Z, QIAN G, et al. Machine learning based very-high-cycle fatigue life prediction of Ti-6Al-4V alloy fabricated by selective laser melting[J]. International Journal of Fatigue, 2022, 158: 106764.
- [97] ZHU S, ZHANG Y, CHEN X, et al. A multi-algorithm integration machine learning approach for high cycle fatigue prediction of a titanium alloy in aero-engine[J]. Engineering Fracture Mechanics, 2023, 289: 109485.
- [98] SHEN C, WANG C, WEI X, et al. Physical metallurgy-guided machine learning and artificial intelligent design of ultrahigh-strength stainless steel[J]. Acta Materialia, 2019, 179: 201-214.
- [99] ZHAN Z, AO N, HU Y, et al. Defect-induced fatigue scattering and assessment of additively manufactured 300M-AerMet100 steel: an investigation based on experiments and machine learning[J]. Engineering Fracture Mechanics, 2022, 264: 108352.
- [100] ZHU B, CHEN Z, HU F, et al. Feature extraction and microstructural classification of hot stamping ultra-high strength steel by machine learning[J]. JOM, 2022, 74(9): 3466-3477.
- [101] HE L, WANG Z, OGAWA Y, et al. Machine-learning-based investigation into the effect of defect/inclusion on

- fatigue behavior in steels[J]. *International Journal of Fatigue*, 2022, 155: 106597.
- [102] XU P, CHEN C, CHEN S, et al. Machine learning-assisted design of yttria-stabilized zirconia thermal barrier coatings with high bonding strength[J]. *ACS Omega*, 2022, 7(24): 21052-21061.
- [103] ZHU H, LI D, YANG M, et al. Prediction of microstructure and mechanical properties of atmospheric plasma-sprayed 8YSZ thermal barrier coatings using hybrid machine learning approaches[J]. *Coatings*, 2023, 13(3): 602.
- [104] LIU Y, CHEN K, KUMAR A, et al. Principles of machine learning and its application to thermal barrier coatings[J]. *Coatings*, 2023, 13(7): 1140.
- [105] ZHU W, GAN M, YE B, et al. Optimization of the thermophysical properties of the thermal barrier coating materials based on GA-SVR machine learning method: illustrated with ZrO<sub>2</sub> doped DyTaO<sub>4</sub> system[J]. *Materials Research Express*, 2021, 8(12): 125503.
- [106] AILSWORTH Z, CHEN W B, LU Y, et al. A hybrid image segmentation approach for thermal barrier coating quality assessments[C]//2021 IEEE 4th International Conference on Multimedia Information Processing and Retrieval. Piscataway, New Jersey: IEEE, 2021: 172-178.
- [107] SHAN X, HUANG T, LUO L, et al. Automatic recognition of microstructures of air-plasma-sprayed thermal barrier coatings using a deep convolutional neural network[J]. *Coatings*, 2023, 13(1): 29.
- [108] SHI L, LONG Y, WANG Y, et al. Evaluation of internal cracks in turbine blade thermal barrier coating using enhanced multi-scale faster R-CNN model[J]. *Applied Sciences*, 2022, 12(13): 6446.
- [109] HE X, SONG P, HUANG T, et al. Fracture process simulation and crack resistance behavior analysis of transition-layer ceramic coating based on real image reconstruction model[J]. *Surfaces and Interfaces*, 2024, 46: 104003.
- [110] SUN F, FAN M, CAO B, et al. Terahertz based thickness measurement of thermal barrier coatings using long short-term memory networks and local extrema[J]. *IEEE Transactions on Industrial Informatics*, 2022, 18(4): 2508-2517.
- [111] YUAN B, WANG W, YE D, et al. Nondestructive evaluation of thermal barrier coatings thickness using terahertz technique combined with PCA-GA-ELM algorithm[J]. *Coatings*, 2022, 12(3): 390.
- [112] LI R, YE D, XU J, et al. Multi-scale analysis of terahertz time-domain spectroscopy for inversion of thermal growth oxide thickness in thermal barrier coatings[J]. *Coatings*, 2023, 13(7): 1294.
- [113] SPRAGUE A, TAVOUSHI P, SHAHBAZMOHAMADI S, et al. Automatic nondestructive detection of damages in thermal barrier coatings using image processing and machine learning[J]. *Microscopy and Microanalysis*, 2022, 28(Suppl 1): 3068-3072.
- [114] LIU Z Y, YANG L, ZHOU Y C. A multiscale model integrating artificial neural networks for failure prediction in turbine blade coatings[J]. *Surface and Coatings Technology*, 2023, 457: 129218.
- [115] GAO R, MAO W, WANG Y, et al. Intelligent life prediction of thermal barrier coating for aero engine blades[J]. *Coatings*, 2021, 11(8): 890.
- [116] 段东升. 智能材料在航空工业中的应用和发展建议[J]. *科技创新导报*, 2019, 16(5): 12-14.  
DUAN D S. Application and development suggestions of smart materials in the aviation industry[J]. *Science and Technology Innovation Herald*, 2019, 16(5): 12-14.
- [117] 裘进浩, 季宏丽, 徐志伟, 等. 智能材料与结构及其在智能飞行器中的应用[J]. *南京航空航天大学学报*, 2022, 54(5): 867-888.  
QIU J H, JI H L, XU Z W, et al. Smart materials and structures and their applications on smart aircraft[J]. *Journal of Nanjing University of Aeronautics & Astronautics*, 2022, 54(5): 867-888.
- [118] LENZEN N, ALTAY O. Machine learning enhanced dynamic response modelling of superelastic shape memory alloy wires[J]. *Materials*, 2022, 15(1): 304.
- [119] KANKANAMGE U M H U, REINER J, MA X, et al. Machine learning guided alloy design of high-temperature NiTiHf shape memory alloys[J]. *Journal of Materials Science*, 2022, 57(41): 19447-19465.
- [120] ZHAO X P, HUANG H Y, WEN C, et al. Accelerating the development of multi-component Cu-Al-based shape memory alloys with high elastocaloric property by machine learning[J]. *Computational Materials Science*, 2020, 176: 109521.
- [121] TREHERN W, ORTIZ-AYALA R, ATLI K C, et al. Data-driven shape memory alloy discovery using artificial intelligence materials selection(AIMS) framework[J]. *Acta Materialia*, 2022, 228: 117751.
- [122] HE J, LI J, LIU C, et al. Machine learning identified materials descriptors for ferroelectricity[J]. *Acta Materialia*, 2021, 209: 116815.
- [123] LONG T, FORTUNATO N M, ZHANG Y, et al. An accelerating approach of designing ferromagnetic materials via machine learning modeling of magnetic ground state and Curie temperature[J]. *Materials Research Letters*, 2021, 9(4): 169-174.
- [124] XIN C, YIN Y, SONG B, et al. Machine learning-accel-

- erated discovery of novel 2D ferromagnetic materials with strong magnetization[J]. *Chip*, 2023, 2(4): 100071.
- [125] SAPKAL S, KANDASUBRAMANIAN B, DIXIT P, et al. Machine learning aided accelerated prediction and experimental validation of functional properties of  $K_{1-x}Na_xNbO_3$ -based piezoelectric ceramics[J]. *Materials Today Energy*, 2023, 37: 101402.
- [126] LI W, YANG T, LIU C, et al. Optimizing piezoelectric nanocomposites by high-throughput phase-field simulation and machine learning[J]. *Advanced Science*, 2022, 9(13): 2105550.
- [127] YUAN R, XUE D, XU Y, et al. Machine learning combined with feature engineering to search for  $BaTiO_3$  based ceramics with large piezoelectric constant[J]. *Journal of Alloys and Compounds*, 2022, 908: 164468.
- [128] XUE D, BALACHANDRAN P V, YUAN R, et al. Accelerated search for  $BaTiO_3$ -based piezoelectrics with vertical morphotropic phase boundary using Bayesian learning[J]. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 2016, 113(47): 13301-13306.

收稿日期: 2024-04-01; 录用日期: 2024-05-22

基金项目: 国家自然科学基金(52071168); 云南省重点研发计划(202303AP140016); 云南省重大科技专项(202202AB080011)

通讯作者: 宋鹏(1979—), 男, 博士, 教授, 研究方向为涂层材料结构设计与制备, 联系地址: 云南省昆明市呈贡区昆明理工大学民航与航空学院(650093), E-mail: songpeng@kust.edu.cn

(本文责编: 王俊丽)