

基于数据挖掘技术的燃机透平叶片热障涂层孔隙率预测及力学性能研究

王伟^{1,2}, 裴晟堃^{3,4a*}, 巩秀芳^{1,2}, 聂丽萍^{1,2},
丁娟强^{1,2}, 王翠萍^{5*}, 刘兴军^{4a,4b,5*}

(1. 清洁高效透平动力装备全国重点实验室, 四川 德阳 618000; 2. 东方电气集团东方汽轮机有限公司, 四川 德阳 618000; 3. 深圳市鸿晶科技有限公司, 广东 深圳 518055; 4. 哈尔滨工业大学 (深圳) a. 材料科学与工程学院 b. 先进焊接与连接国家重点实验室, 广东 深圳 518055; 5. 厦门大学 材料学院, 福建 厦门 361005)

摘要: **目的** 预测燃机透平叶片热障涂层孔隙率, 加速热障涂层的研发及工艺优化, 解决传统实验方法效率低、成本高的问题, 为重型燃气轮机热障涂层研发及工业实际生产中的具体工艺参数调控提供一定指导。**方法** 采用 MATLAB 图像二值化处理技术计算陶瓷层的孔隙率数据, 训练机器学习模型, 预测不同工艺参数下热障涂层陶瓷层的孔隙率, 并通过实验验证测试涂层的硬度和孔隙率。**结果** Gradient Boosting Regression 模型能够实现对热障涂层孔隙率的准确预测, 喷涂功率、送粉率和喷涂距离对孔隙率的影响较大。机器学习具有一定的外延性, 模型的 R 值 (Related Coefficient, R) 由 0.834 4 提高到 0.943 0, R^2 值 (Square of Related Coefficient, R^2) 从 0.696 2 提高到 0.889 2, 而 MAE 的值 (Mean Absolute Error, MAE) 从 1.344 0 降低到 1.039 4, RMSE 值 (Root Mean Squared Error, RMSE) 由 1.881 0 减少到 1.712 8。随孔隙率的降低, 等离子喷涂 8YSZ 陶瓷涂层的硬度由 3.98 GPa 增加到 5.54 GPa, 弹性模量由 62.36 GPa 提高到 84.30 GPa。该模型准确预测了不同工艺下的涂层孔隙率。**结论** 喷涂功率、送粉率和喷涂距离决定了热障涂层的孔隙率, 热障涂层的孔隙率与其硬度和弹性模量息息相关。本工作利用机器学习准确预测了不同工艺下的涂层孔隙率, 证明机器学习算法在重型燃气轮机透平叶片热障涂层研发、工艺优化及生产中具有一定的应用前景。

关键词: 燃气轮机; 热障涂层; 孔隙率; 数据挖掘; 机器学习

中图分类号: TG174.4 文献标志码: A 文章编号: 1001-3660(2024)17-0208-10

DOI: 10.16490/j.cnki.issn.1001-3660.2024.17.020

Prediction of Porosity of Thermal Barrier Coatings for Gas Turbines Blades Based on the Data-mining Technology

WANG Wei^{1,2}, XI Shengkun^{3,4a*}, GONG Xiufang^{1,2}, NIE Liping^{1,2},
DING Juanqiang^{1,2}, WANG Cuiping^{5*}, LIU Xingjun^{4a,4b,5*}

(1. State Key Laboratory of Clean and Efficient Turbomachinery Power Equipment, Sichuan Deyang 618000, China; 2. Dongfang Turbine Co., Ltd. of Dongfang Electric Corporation, Sichuan Deyang 618000, China; 3. Shenzhen Hongjing Technology Co., Ltd., Guangdong Shenzhen 518055, China; 4. a. School of Materials Science and Engineering,

收稿日期: 2023-10-23; 修订日期: 2024-04-17

Received: 2023-10-23; Revised: 2024-04-17

引文格式: 王伟, 裴晟堃, 巩秀芳, 等. 基于数据挖掘技术的燃机透平叶片热障涂层孔隙率预测及力学性能研究[J]. 表面技术, 2024, 53(17): 208-217.

WANG Wei, XI Shengkun, GONG Xiufang, et al. Prediction of Porosity of Thermal Barrier Coatings for Gas Turbines Blades Based on the Data-mining Technology[J]. Surface Technology, 2024, 53(17): 208-217.

*通信作者 (Corresponding author)

b. State Key Laboratory of Advanced Welding and Joining, Harbin Institute of Technology, Guangdong Shenzhen 518055, China; 5. College of Materials and Fujian Provincial Key Laboratory of Materials Genome, Xiamen University, Fujian Xiamen 361005, China)

ABSTRACT: Thermal barrier coating has been widely used in gas turbines, aircraft engines and other advanced power equipment due to its excellent performance in high temperature oxidation resistance, corrosion resistance and surface temperature reducing. The ceramic layer contains defects such as pores, microcracks, unmelted particles, microcracks, and interlayer interfaces. After long-term service at high temperature, the microstructure of the coating changes, which directly affects the insulation ability and mechanical properties of the coating, i.e., the porosity of the thermal barrier coating is directly related to its properties. However, the traditional experimental method has low research efficiency, there are many factors influencing the porosity of thermal barrier coatings, and the preparation process of thermal barrier coatings is very complex, with dozens of factors determining their performance. In order to further shorten the development and process optimization time of thermal barrier coatings, mathematical methods need to be used to establish models and analyze data to accelerate the development process. In this context, the branch of artificial intelligence data mining technology based on machine learning algorithms has gradually been introduced into the research and development of materials. Different from traditional mathematical fitting, data mining methods can establish nonlinear models and support simultaneous consideration of hundreds or even thousands of variables, allowing for extrapolation predictions without overfitting. In this work, the data mining technology was used to analyze the spraying data of thermal barrier coatings on heavy-duty gas turbine blades, establish multiple machine learning models that described the quantitative relationship between thermal barrier coating porosity and process parameters, compare the predictive effects of each machine learning, and test the predictive effects of the model using data from actual research and development processes. The MATLAB image binarization processing technology was used to calculate the porosity data of the ceramic layer, train a machine learning model to predict the porosity of the ceramic layer of the thermal barrier coating under different process parameters, and verify and test the hardness and porosity of the coating through experiments. According to the "No Free Lunch" theorem, no algorithm could be universally applicable to all situations. After trying with multiple machine learning algorithms, it was found that the Gradient Boosting Regression model was able to accurately predict the porosity of thermal barrier coatings, with spray power, powder feeding rate, and spray distance having the greatest impact on porosity. Machine science had a certain degree of extensibility, with the R value of the model increasing from 0.834 4 to 0.943 0, the R^2 value increasing from 0.696 2 to 0.889 2, the MAE value decreasing from 1.344 0 to 1.039 4, and the RMSE value decreasing from 1.881 0 to 1.712 8. As the porosity decreased, the hardness value of plasma sprayed 8YSZ ceramic coating increased from 3.98 GPa to 5.54 GPa, and the Young's modulus increased from 62.36 GPa increased to 84.30 GPa. This model accurately predicts the porosity of coatings under different processes. Machine learning is used to predict the coating porosity under different processes accurately, it is proved that machine learning algorithms have certain application prospects in the research and development, process optimization, and production of thermal barrier coatings for heavy-duty gas turbine blades.

KEY WORDS: gas turbine; thermal barrier coatings; porosity; data-mining; machine learning

随着航空、能源工业的发展, 重型燃气轮机和航空发动机正朝着高进气口温度、高可靠性和高效率等方向发展, 这需要不断提高涡轮的进气口温度^[1]。由于热障涂层 (Thermal Barrier Coatings, TBCs) 具有隔热及高温防护等作用, 可以使涡轮允许进气口温度大大提高, 从而显著降低合金的表面温度, 延长发动机的使用寿命, 并提高能量利用率^[2-5]。热障涂层的隔热性能和力学性能与其显微组织息息相关, 它是一种多层结构, 包含 CoNiCrAlY 黏结层 (Bond Coat, BC) 和氧化钇稳定的氧化锆 (Yttrium Stabilized Zirconia, YSZ) 陶瓷层 (Top Coat, TC)^[6]。陶瓷层内含有孔洞、微裂纹、未熔颗粒、微裂纹和层片界面

等缺陷, 在经过高温长时间服役后, 涂层的组织结构将会发生改变, 这种改变直接影响着涂层隔热能力和力学性能^[7-8]。

为了提高热障涂层的综合性能, 需要获得“工艺-组织-性能”之间的定量描述^[9-11]。然而, 热障涂层的制备过程十分复杂, 决定其性能的因素多达数十个, 传统的实验手段研究效率较低, 无法满足热障涂层的快速研发需求。为了进一步缩短热障涂层研发和工艺优化时间, 需要通过数学方法建立模型并对数据进行分析以加速研发进程。

随着数据处理方法的进步, 以及硬件设施的支持, 人工智能的分支——以机器学习算法为基础的数

据挖掘技术被逐渐引进材料的研发工作中^[12-14]。与传统的数学拟合不同,数据挖掘方法可以建立非线性模型,并且可以支持同时考虑上百甚至上千个变量,在没有过拟合的前提下可以进行外推预测^[15]。数据挖掘方法除了可以做回归分析以外,还具备分类、聚类^[16]等功能,可以处理不具备数据标签的数据,即发现变量间的隐藏关系,为工艺参数的调控进行指导。该方法已经用于预测合金、陶瓷及复合材料、聚合物、二维材料、有机-无机杂化物等各种不同类型的材料^[17]。

Ye 等^[18]使用多种机器学习模型预测了不同工艺参数下影响热障涂层微观组织结构的折射率、消光系数,提出了一种高效的微观结构特征表征技术,表征了 TBCs 的孔隙率等信息。他们发现,3 个机器学习模型对影响热障涂层的微观组织不同参数预测效果各有优劣,通过这种方法建立的模型有着理论依据支撑。他们还利用太赫兹光谱表征了数据训练神经网络模型,成功预测了热障涂层的微观组织。

Cao 等^[19]利用数据挖掘技术提取了热障涂层在不同服役条件下的无损检测数据,并利用支持向量机成功预测出了热障涂层的断裂行为。然而,基于数据挖掘方法预测热障涂层孔隙率的工作较少,通过预测热障涂层微观组织研究其综合性能关系的工作也较少。

本文采用数据挖掘技术,对重型燃气轮机透平叶片热障涂层喷涂数据进行分析,建立多个描述热障涂层孔隙率和工艺参数之间定量关系机器学习模型,对

比各机器学习的预测效果,并采用实际研发过程中的数据对模型预测效果进行检验。

1 研究方法

1.1 样品制备

利用 Oerlikon Metco 公司大气等离子喷涂设备 F4 喷枪制备 TBCs 陶瓷涂层样品。使用 Mar M247 高温合金作为基体材料,其成分见表 1,尺寸为 $\phi 25.4\text{ mm}\times 5\text{ mm}$ 。在喷涂之前,首先采用 $700\text{ }\mu\text{m}$ (24#) 的白刚玉砂对金属基体进行喷砂处理。黏结层使用 NiCoCrAlY 合金粉末,粒度分布在 $15\sim 45\text{ }\mu\text{m}$ 。将陶瓷层粉末喷涂在黏结层上,使用 8% Y_2O_3 稳定的氧化锆 (8YSZ, Metco 204NS-G, Oerlikon Metco, 瑞士),其粒度分布在 $11\sim 125\text{ }\mu\text{m}$ 。NiCoCrAlY 黏结层粉末和 8YSZ 粉末的成分分别见表 2 和表 3。所有的样品截面先用 200、240、280、320、400、600、1 000、1 200 目 (75、61、55、45、38、23、13、 $11\text{ }\mu\text{m}$) 的水砂纸打磨,然后分别用粒径为 3.5、1、 $0.25\text{ }\mu\text{m}$ 的金刚石悬浮液抛光。热障涂层的制备工艺见表 4。

1.2 热障涂层显微结构表征

本研究使用德国 Leica DM6M 金相显微镜观察等离子喷涂 8YSZ 热障涂层截面的显微形貌,主要观察研究涂层的组织结构及内部微观缺陷 (孔洞、微裂纹和层片界面等)。

表 1 Mar M247 高温合金的化学成分
Tab.1 Chemical composition of Mar M247 superalloy

wt.%											
C	Cr	Co	Mo	W	Ta	Ti	Al	B	Zr	Hf	Ni
0.16	8.2	0.6	10.0	3.0	1.0	1.0	5.5	0.2	0.09	1.5	Bal.

表 2 NiCoCrAlY 粉末的化学成分
Tab.2 Chemical composition of NiCoCrAlY powder

wt.%								
Ni	Co	Cr	Al	Y	C	Bi	T.A.O	Moisture
47.06	22.16	16.78	12.11	0.44	0.01	1.00	<0.10	0.04

表 3 8% $\text{Y}_2\text{O}_3\text{-ZrO}_2$ 粉末的化学成分
Tab.3 Chemical composition of 8wt.% $\text{Y}_2\text{O}_3\text{-ZrO}_2$ powder

wt.%						
ZrO_2	Y_2O_3	HfO_2	TiO_2	MgO	T.A.O	Moisture
90.67	7.46	1.64	0.10	0.02	<0.11	0.04

表 4 涂层喷涂工艺参数
Tab.4 Parameters of coating spraying process

Coating	Arc current/A	Arc voltage/V	Ar flow rate/($\text{L}\cdot\text{min}^{-1}$)	H_2 flow rate/($\text{L}\cdot\text{min}^{-1}$)	Powder feeding rate/($\text{g}\cdot\text{min}^{-1}$)	Powder feeding voltage/V	Spray distance/mm
Ceramic top coat 8YSZ	600	70	45	10	30	12	90
Bond coat NiCoCrAlY	500	65	45	8	60	9	130

涂层显微组织结构的致密程度可以通过孔隙率来反映, 是影响涂层性能的重要参数之一。本研究采用 MATLAB 图像二值化处理技术计算陶瓷层的孔隙率。首先采集 TBCs 的横截面照片; 然后利用 MATLAB 软件在选定的灰度水平下将金相照片转化为黑白二进制图片, 增大孔隙与涂层本身的对比度, 有利于识别孔隙边界; 最后, 采用图像灰度自适应的阈值分割算法计算出图中孔隙在整个涂层中所占的像素数量比例。为了保证测量结果的准确性及可重复性, 每个样品至少提取 10 个不同位置的 SEM 图像重复此计算过程, 然后取其平均值作为该涂层的孔隙率。

1.3 热障涂层硬度和弹性模量测试方法

仪器化压痕实验的压头类型是维氏压头, 采用恒载荷速率法, 设定加载速率与卸载速率均为 5 N/s, 保载时间为 10 s, 峰值载荷设置为 100 N。每次测试保证 2 个压痕间的距离大于 3 mm, 以减小由于应变场之间存在的互相影响而产生的测试误差。为减小测试数据的离散性和保证实验结果的精确性, 每个试样测试 16 次, 并运用韦伯统计方法进行分析。

硬度值和弹性模量可通过仪器化压痕实验获取的数据分析得到。等离子喷涂 8YSZ TBCs 的显微结构复杂, 其内部存在大量孔隙、微裂与层片界面等缺陷。在高温热处理过程中, 涂层的显微结构会发生改变, 并且对于同一个样品不同的测试位置、不同的压痕实验力下所获得的压痕载荷-位移曲线都会有所差异, 这导致了相应的弹性模量及硬度的计算值具有较大的分散性^[20]。

韦伯统计分析方法已被广泛用于评价涂层的力学性能, 能够有效解决数据分散性的问题^[21-22]。本文采用韦伯统计分析实验测得的数据以有效描述由压痕载荷-位移曲线得到的热障涂层硬度和弹性模量的分布规律。测试参数 χ 的累计概率密度函数 F 可以写成:

$$F = 1 - \exp \left[- \left(\frac{\chi}{\chi_0} \right)^m \right] \quad (1)$$

式中: χ_0 与 m 均为常数, 分别表示 Weibull 分布的特征值和 Weibull 模数。通常 m 值越大, 则表示测试的结果发散程度越小。 χ 为测试值, 在本文中代表的是由压痕实验测得的弹性模量和硬度。对式 (1) 两边取对数, 则有:

$$\ln[-\ln(1-F)] = m(\ln \chi - \ln \chi_0) \quad (2)$$

令 $\ln[-\ln(1-F)]$ 为 y 轴, $\ln \chi$ 为 x 轴, 该直线方程的斜率就是 Weibull 模数。根据截距和模数值即可得到 χ_0 。将实际测得的实验数据由小到大的顺序排列, 即 $\chi_1, \chi_2, \dots, \chi_n$, χ 值不高于 χ_i 的概率 F_i 可表示为:

$$F_i = \frac{i-0.5}{N} \quad (3)$$

式中: N 为测试值的数量; i 的取值为 1, 2, ..., $N-1, N$ 。将式 (3) 所得到的各个 F 值及对应的从压痕载荷-深度曲线计算出的弹性模量或硬度值分别代入式 (2), 并运用最小二乘法进行线性拟合, 就可以得到其特征值和 Weibull 模数^[23]。

1.4 基于机器学习的预测模型构建方法

1.4.1 数据预处理

热障涂层的制备工艺较复杂, 涉及的工艺参数繁多, 其孔隙率与涂层的性能直接相关。孔隙率较高时, 涂层的热导率会变低, 但是抗氧化性及力学性能可能会下降, 因此需要对陶瓷层中的孔隙率进行调控。陶瓷层中的孔隙率主要受涂层制备工艺影响, 包括喷涂电流、喷涂电压、功率、一次气体 Ar 流量、二次气体 H_2 流量、送粉率、喷涂距离、喷涂速度、预热回数、喷涂遍数、涂层厚度等。

本研究通过对陶瓷层的数据进行数据挖掘, 将热障涂层的喷涂参数、陶瓷层的孔隙率等数据收集起来, 并建立数据库, 将热障涂层的喷涂参数设为 X , 涂层的孔隙率设为 Y 。不同影响因素的数据分布不在同一个尺度下, 其分布范围之间可能存在较大的差别。为了保证机器学习算法对数据的分析效率与精度, 需要对数据进行预处理。本研究采用 Z-Score 数据归一化对数据进行预处理, 经过处理的数据的均值为 0, 标准差为 1, 转化公式为:

$$x^* = \frac{x - \bar{x}}{\sigma} \quad (4)$$

式中: σ 为原始数据的标准差; \bar{x} 为原始数据的均值, 在均值之上的原始数据会得到一个正的标准化分数, 反之会得到一个负的标准化分数。

1.4.2 机器学习算法预测性能评估

根据 “No Free Lunch” 定理, 没有一种算法可以普适所有的情形, 即一种算法 (算法 A) 在特定数据集上的表现优于另一种算法 (算法 B) 的同时, 一定伴随着算法 A 在另外某一个特定的数据集上有着不如算法 B 的表现。因此, 本文采用多种机器学习算法来预测陶瓷层的孔隙率, 模型表现最好的机器学习模型将被应用。

因孔隙率为连续型数据, 因此采用回归算法进行预测模型的建立。本研究中使用随机森林回归 (Random Forest Regression, RFR)、梯度提升回归 (Gradient Boosting Regression, GBR)、AdaBoost 回归算法 (AdaBoost Regression)、支持向量回归 (Support Vector Regression, SVR)、人工神经网络 (Artificial Neural Network, ANN)、K 近邻回归 (K-Nearest Neighbors Regression, KNNR) 和高斯过程回归 (Gaussian Process Regression, GPR) 算法建立回归模型。这些算法均采用 Python 3.0 中的 sklearn 工具包实现, 使用 PC 完成所有的计算 (Microsoft

Windows 10, Intel Core (TM) i7-10875H, CPU 2.30 GHz, 16 GB of RAM)。

本文采用 K 折交叉验证方法对模型是否出现过拟合进行检测。由于 K 折交叉验证的测试结果不依赖于训练集, 因此可以避免过拟合的出现。原始数据集被随机分为 K 个相等的子集, 其中一个子集用作测试集, 其他子集用作新的训练集。每一个子集应轮流作为验证数据, 也就是说, 需要将上述过程重复 K 次。一般来说, K 是一个不固定的参数, K 取 5 或 10 比较常用^[24-25]。本文中, 将 K 设置为 10。

回归模型是预测数值型变量, 具有连续的特点。衡量回归模型性能的指标有 R (Related Coefficient, R), R^2 (Square of Related Coefficient, R^2)、 η_{MAE} (Mean Absolute Error, MAE) 和 η_{RMSE} (Root Mean Squared Error, RMSE)^[25-26]。

$$R = \frac{\sum_{i=1}^N (y_i - \bar{y})(\hat{y}_i - \bar{\hat{y}})}{\sqrt{\sum_{i=1}^N (y_i - \bar{y})^2 \sum_{i=1}^N (\hat{y}_i - \bar{\hat{y}})^2}} \quad (5)$$

$$\eta_{MAE} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N |y - \hat{y}| \quad (6)$$

$$\eta_{RMSE} = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (y - \hat{y})^2} \quad (7)$$

式中: y 和 \hat{y} 分别代表力学性能的真实值和模型的预测值; n 是数据的条数; R 的取值范围是 $(-1, 1)$, 可以得出 R^2 的取值范围为 $(0, 1)$ 。当 R 值趋近于 1 时, 说明模型的预测性能较好。模型的预测误差用 MAE 和 RMSE 来衡量。MAE 反映了真实误差, 而 RMSE 对异常值更为敏感。

1.4.3 机器学习模型的修正

机器学习模型的修正过程如图 1 所示。首先采用训练好的模型对新工艺参数制备的热障涂层孔隙率进行预测, 然后对上述机器学习预测的数据进行实验

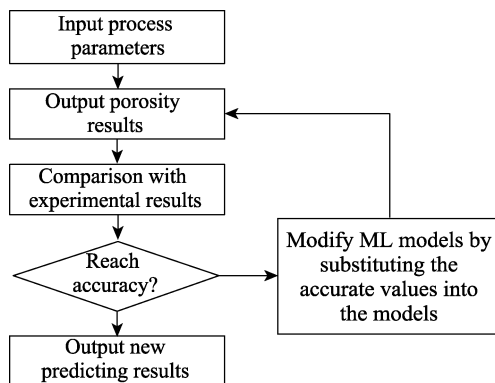


图 1 机器学习模型的修正过程
Fig.1 Correction process of machine learning model

验证。如果模型的预测精度不能满足人为设定的精度要求, 则将新获得的数据反馈给机器学习模型进行修正, 并重复以上过程, 直到模型的预测精度满足人为设定的精度要求, 则利用模型预测出更多新工艺参数制备的热障涂层得到孔隙率, 从而实现新体系微观信息的快速预测。

2 结果与讨论

2.1 热障涂层孔隙率预测结果

各回归模型在训练集上的模型表现如图 2 所示。可以看出, 相比于其他机器学习模型, GBR 算法的精度最高、误差最小。因此, GBR 模型的预测效果最好, 其相关系数 R 达到了 0.995 8, R^2 、MAE 和 RMSE 的值分别为 0.991 6、 2.78×10^{-10} 和 3.44×10^{-10} 。模型的预测结果如图 3 所示, 可以发现, GBR 模型对数据的学习程度很高。

一个优秀的回归算法是其具有高相关系数和低均方根误差的充分条件而非必要条件。因此, 具有高相关系数和低均方根误差的算法还可能出现了过拟合的情况, 可以通过交叉验证来避免过拟合问题。

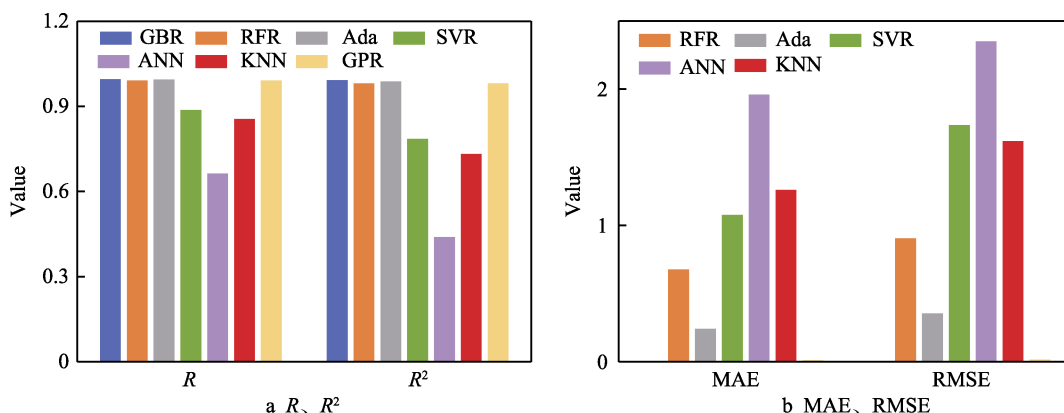


图 2 各回归模型在训练集上的预测性能
Fig.2 Predictive performance of each regression model on the training set

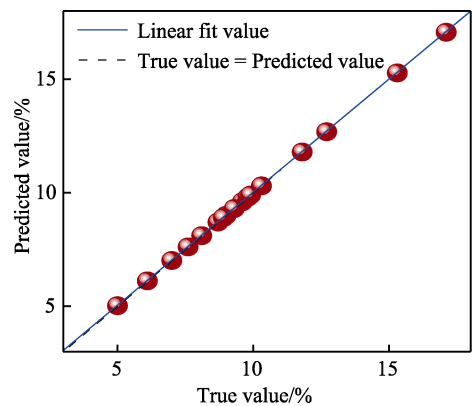


图 3 GBR 模型对孔隙率的预测结果
Fig.3 Prediction results of GBR model on porosity

基于交叉验证的各回归模型在训练集上的模型表现如图 4 所示。可以发现, GBR 算法的精度最高、误差最小。因此, GBR 模型的预测效果最好, 其相关系数 R 达到了 0.834 4, R^2 、MAE 和 RMSE 的值分别为 0.696 2、1.344 0、1.881 0。后续可以用 GBR 模型预测热障涂层的孔隙率, GBR 模型的参数为 $n_estimators=450$, $max_depth=5$, $max_features=4$ 。模型的预测结果如图 5 所示, 可以发现, 模型预测结果的准确性较好, 但仍存在一定的误差。

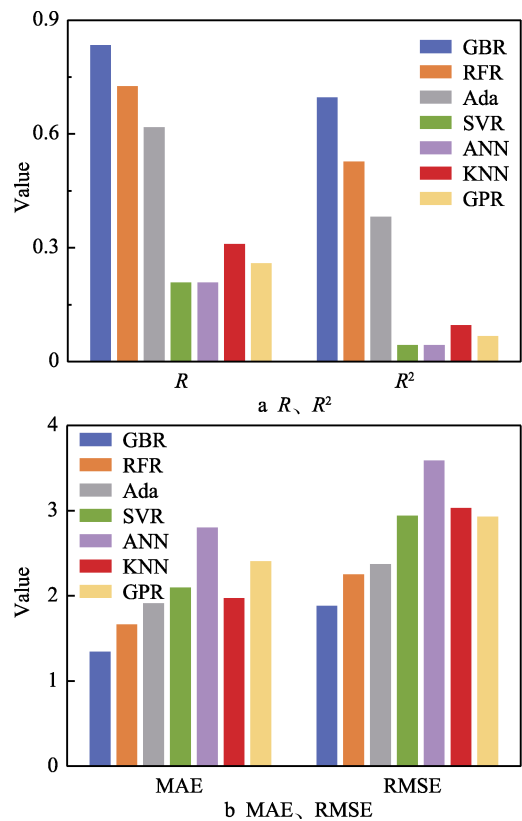


图 4 基于交叉验证的各回归模型在训练集上的预测性能
Fig.4 Predictive performance of cross-validated regression models on the training set

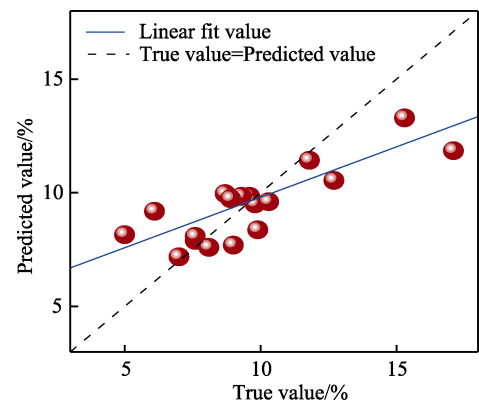


图 5 基于交叉验证的 GBR 模型对孔隙率的预测结果
Fig.5 Prediction results of GBR model based on cross-validation for porosity

重要性较高的特征对孔隙率起决定性的作用。本研究采用相对重要性 (I_r) 来衡量各特征的重要性, I_r 定义如下:

$$I_r = \frac{I_T}{I_{\max}}$$

(9)

式中: I_T 是通过模型计算出的特征重要性; I_{\max} 是这些特征重要性的最大值。 I_r 的取值范围为 0~1。由于特征名称过长, 后续采用代码替换特征名称, 见表 5。影响热障涂层孔隙率各特征的相对重要性排序如图 6 所示。通过和实际生产经验对比, 模型预测的重要性排序有一定的一致性, 根据模型得到的相对重要性排序, 可在之后的设计优化过程中着重调整影响最大的几种影响因素, 包括喷涂功率、送粉率和喷涂距离等工艺参数。

2.2 热障涂层孔隙率预测模型的修正及应用

利用建立好的机器学习模型对不同其他工艺参数下制备的热障涂层的孔隙率进行预测, 规定每轮次随机实验验证 3 条数据, 以检验机器学习的预测效

表 5 特征及其代码对照
Tab.5 Features and their code comparison

Feature Name	Code
Current	A
Voltage	B
Power	C
Ar flow rate	D
H ₂ flow rate	E
Carrier gas flow rate	F
Powder feed rate	G
Spraying distance	H
Spraying speed	I
Number of preheating cycles	J
Number of spraying passes	K
Coating thickness	L

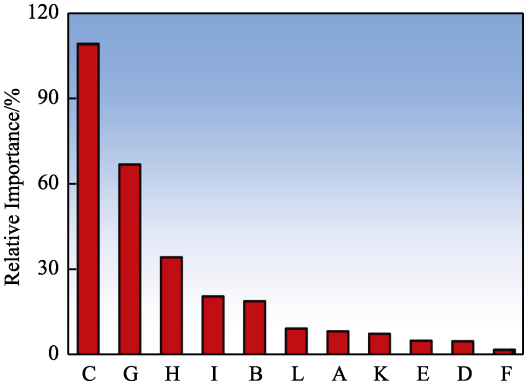


图 6 影响热障涂层孔隙率各特征的相对重要性排序
Fig.6 Relative importance ranking of features affecting the porosity of thermal barrier coatings

果。对于该 3 条检验数据，热障涂层的孔隙率预测模型的修正过程如图 7 所示，模型相关系数 R 的提高过程如图 8 所示。可以看出，机器学习模型经过 2 轮修正后，模型表现大大提高。模型在修正前，其 R 值为 0.486 9，模型经过 2 轮修正后， R 值提高到了 0.981 6。为了验证机器学习模型的泛化能力，采用不同工艺参

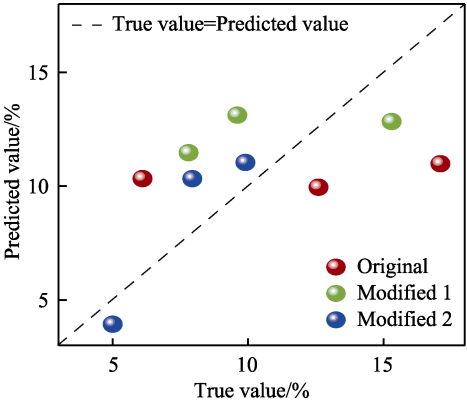


图 7 热障涂层孔隙率预测模型的修正过程
Fig.7 Modification process of porosity prediction model of thermal barrier coating

数另外制备了若干 TBCs 样品，并对经过 2 轮修正后的机器学习模型预测结果进行实验验证。部分热障涂层横截面照片及其二值化处理图像如图 9 所示。

利用修正好的机器学习模型预测了不同工艺参数下热障涂层陶瓷层的孔隙率。修正后的热障涂层孔隙率预测模型的整体预测结果如图 10 所示，其模型表现如图 11 所示。模型的 R 值达到了 0.943 0， R^2 、MAE 和 RMSE 的值分别为 0.889 2、1.039 4、1.712 8。可以发现，经过修正的热障涂层孔隙率预测模型具有很好的预测性能，证明了机器学习算法预测热障涂层的孔隙率具有外延性。利用修正好的机器学习模型预测了不同工艺参数下热障涂层陶瓷层的孔隙率。

2.3 孔隙率对热障涂层硬度和弹性模量的影响

不同孔隙率的 TBCs 系统，其力学性能不同。因此，对应的载荷-位移曲线也会有所差异。孔隙率为 11.4% 的涂层在加载阶段，压头压入涂层表面会发生弹塑性变形，而卸载阶段，涂层的变形仅回复一部分，即存在残留变形，在涂层横截面上出现残留的压痕痕迹。喷涂态涂层的最大加载深度为 45.12 μm ，而 9.9%、

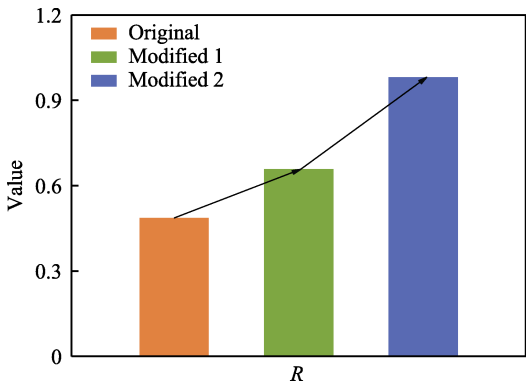


图 8 热障涂层孔隙率预测模型相关系数 R 的提高过程
Fig.8 Improvement process of correlation coefficient R of thermal barrier coating porosity prediction model

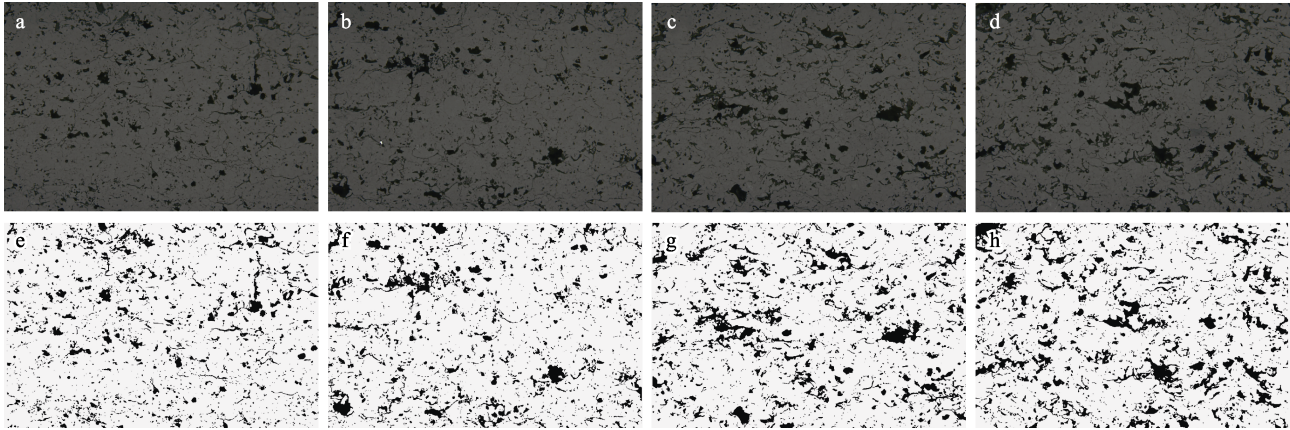


图 9 TBCs 样品横截面照片 (a~d) 及其二值化处理结果 (e~h)
Fig.9 Cross-sectional photos of TBCs samples (a-d) and results of binarization (e-h)

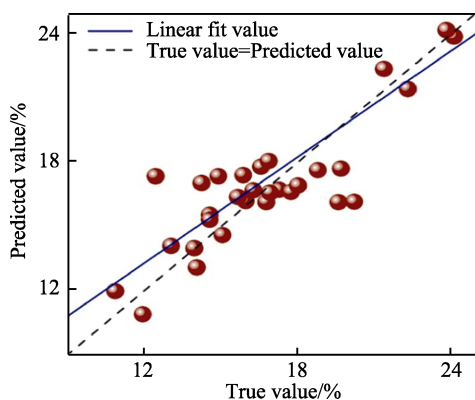


图 10 修正后的热障涂层孔隙率预测模型的整体预测结果

Fig.10 Overall prediction results of modified thermal barrier coating porosity prediction model

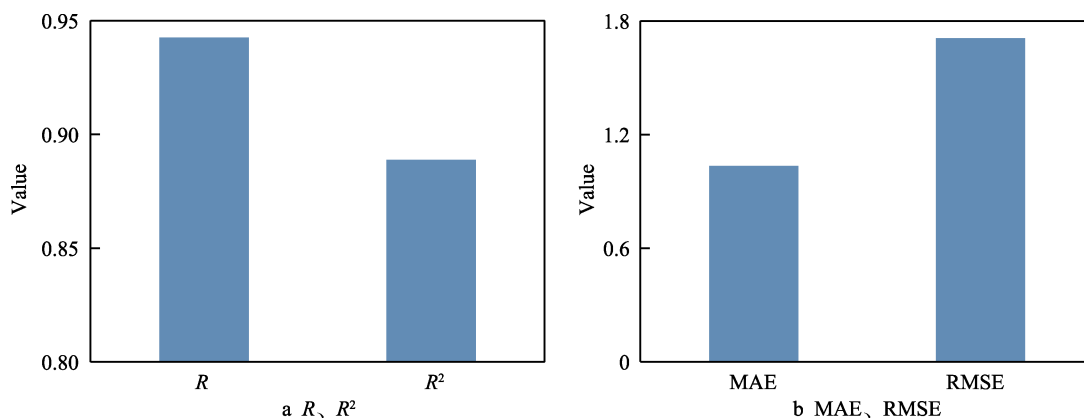


图 11 修正后的热障涂层孔隙率预测模型的模型表现

Fig.11 Model performance of modified porosity prediction model of thermal barrier coating

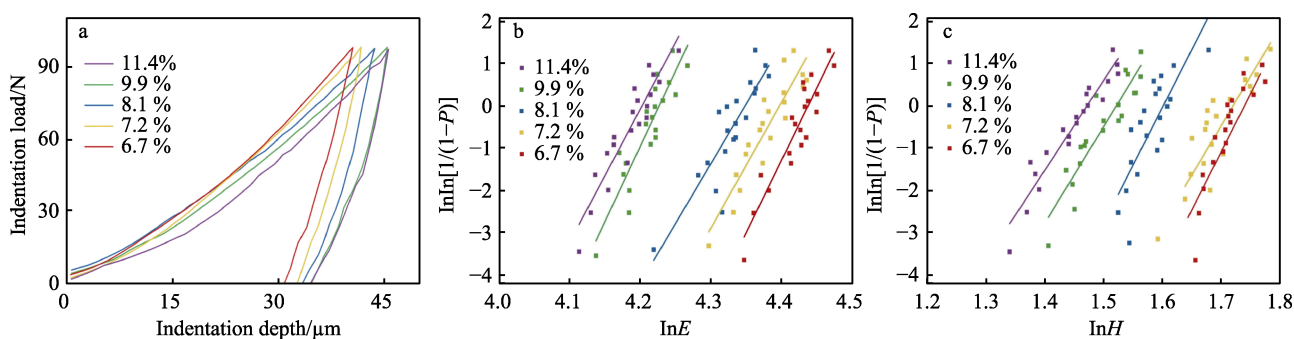


图 12 不同孔隙率对载荷-位移曲线 (a)、弹性模量 Weibull (b) 和维氏硬度 Weibull (c) 统计分布的影响

Fig.12 Influence of different porosity on load-displacement curve (a), Weibull statistical distribution of Young's modulus (b) and Weibull statistical distribution of Vickers hardness (c)

3 结论

本研究中采用多种机器学习算法预测了不同工艺参数下热障涂层陶瓷层的孔隙率, 结果表明: GBR 模型的预测精度最高, 该模型可以有效对热障涂层的孔隙率进行预报。喷涂功率、送粉率和喷涂距离是重要性相对较高的 3 个特征。为了提高模型的泛化能力

8.1%、7.2%、6.7% 的涂层的最大加载深度分别为 45.94、44.14、42.24、41.03 μm 。综上所述, 孔隙率越低, 压头压入涂层的深度越浅, 即涂层表现出的刚度越大, 抵抗弹性变形和塑性变形的能力均有所提高。这是因为孔隙率低的涂层, 整体结构逐渐致密化, 其力学性能参数会随着其显微结构的演化而发生相应变化。

由图 12 的韦伯 (Weibull) 统计结果可计算出: 随孔隙率的降低, 等离子喷涂 8YSZ 陶瓷涂层的硬度值由 3.98 GPa 增加到 5.54 GPa, 弹性模量由 62.36 GPa 提高到 84.30 GPa。孔隙率降低后, 8YSZ 陶瓷层内部的烧结效应、微裂纹闭合以及层片结合力增强会导致其弹性模量和硬度增加^[21], 这个结论与机器学习预测结果相吻合。

及预测精度, 采用新的实验数据对建立好的机器学习模型进行修正。通过对比未修正的机器学习模型, 可以发现修正后的机器学习模型的预测精度显著提高, 特别是模型具备一定的外延性, 模型的 R 值由 0.834 4 提高到 0.943 0, R^2 值从 0.696 2 提高到 0.889 2, 而 MAE 的值从 1.344 0 降低到 1.039 4, RMSE 值由 1.881 0 减少到 1.712 8。孔隙率越低, 压头压入涂层的深度越浅, 即涂层表现出的刚度越大, 抵抗弹性变形和塑

性变形的能力均有所提高。随孔隙率的降低,等离子喷涂 8YSZ 陶瓷涂层的硬度值由 3.98 GPa 增加到 5.54 GPa,弹性模量由 62.36 GPa 提高到 84.30 GPa。本工作研究结果证明机器学习算法在重型燃气轮机透平叶片热障涂层研发、工艺优化及生产中具有一定的应用前景。

参考文献:

- [1] 李志明, 钱士强, 王伟. 热障涂层陶瓷材料的研究现状与展望[J]. 材料保护, 2011, 44(1): 38-41.
LI Z M, QIAN S Q, WANG W. Current Status of Research and Prospect of Ceramic-Matrix Thermal Barrier Coatings[J]. Materials Protection, 2011, 44(1): 38-41.
- [2] 郭洪波, 宫声凯, 徐惠彬. 先进航空发动机热障涂层技术研究进展[J]. 中国材料进展, 2009, 28(9): 18-26.
GUO H B, GONG S K, XU H B. Progress in Thermal Barrier Coatings for Advanced Aeroengines[J]. Materials China, 2009, 28(9): 18-26.
- [3] 裘晟堃, 李强. 四点弯曲条件下热障涂层断裂模式的声发射表征[J]. 中国表面工程, 2019, 32(3): 138-153.
XI S K, LI Q. Characterization of Fracture Modes for Thermal Barrier Coatings by Acoustic Emission under Four-Point Bending[J]. China Surface Engineering, 2019, 32(3): 138-153.
- [4] DOLLMAYER J, BUNDSCHUH N, CARL U B. Fuel Mass Penalty Due to Generators and Fuel Cells as Energy Source of the All-Electric Aircraft[J]. Aerospace Science and Technology, 2006, 10(8): 686-694.
- [5] DAROLIA R. Thermal Barrier Coatings Technology: Critical Review, Progress Update, Remaining Challenges and Prospects[J]. International Materials Reviews, 2013, 58(6): 315-348.
- [6] 刘小菊, 王腾, 李偲偲, 等. 等离子喷涂热障涂层高温 TGO 的形成与生长研究[J]. 表面技术, 2015, 44(11): 91-96.
LIU X J, WANG T, LI S S, et al. Formation and Growth Behavior of TGO in Air Plasma Sprayed Thermal Barrier Coatings at High Temperature[J]. Surface Technology, 2015, 44(11): 91-96.
- [7] 刘洲庠, 于金鑫, 李强. 热障涂层陶瓷层/TGO 界面开裂行为的有限元模拟[J]. 表面技术, 2017, 46(7): 70-76.
LIU Z X, YU J X, LI Q. Finite Element Simulation of Ceramic Layer/TGO Interfacial Crack on Thermal Barrier Coating[J]. Surface Technology, 2017, 46(7): 70-76.
- [8] LI W S, ZHAO H Y, ZHONG X H, et al. Air Plasma-Sprayed Yttria and Yttria-Stabilized Zirconia Thermal Barrier Coatings Subjected to Calcium-Magnesium-Alumino-Silicate (CMAS)[J]. Journal of Thermal Spray Technology, 2014, 23(6): 975-983.
- [9] RANJBAR-FAR M, ABSI J, MARIAUX G, et al. Simulation of the Effect of Material Properties and Interface Roughness on the Stress Distribution in Thermal Barrier Coatings Using Finite Element Method[J]. Materials & Design, 2010, 31(2): 772-781.
- [10] LIU D C, JING Y Z, CUI X F, et al. Study of Toughening Behavior of SiC Whiskers on 8YSZ Thermal Barrier Coatings[J]. Surface and Coatings Technology, 2023, 455: 129232.
- [11] BLANCHARD F, KADI M J, BOUSSER E, et al. Effect of Thermal Ageing on the Optical Properties and Pore Structure of Thermal Barrier Coatings[J]. Surface and Coatings Technology, 2023, 452: 129080.
- [12] NOSENGO N. Can Artificial Intelligence Create the Next Wonder Material?[J]. Nature, 2016, 533: 22-25.
- [13] RACCUGLIA P, ELBERT K C, ADLER P D F, et al. Machine-Learning-Assisted Materials Discovery Using Failed Experiments[J]. Nature, 2016, 533: 73-76.
- [14] UMESHINI S, P S C. A Survey on Data Mining in Steel Industries[J]. International Journal of Computer Science & Engineering Survey, 2017, 8(2): 1-12.
- [15] 彭佳红, 沈岳, 张林峰. 数据挖掘中的特征选择及其算法研究[J]. 计算机工程与设计, 2005, 26(5): 1176-1178.
PENG J H, SHEN Y, ZHANG L F. Search on Feature Selection of Data Mining and Its Algorithms[J]. Computer Engineering and Design, 2005, 26(5): 1176-1178.
- [16] 姜园, 张朝阳, 仇佩亮, 等. 用于数据挖掘的聚类算法[J]. 电子与信息学报, 2005, 27(4): 655-662.
JIANG Y, ZHANG C Y, QIU P L, et al. Clustering Algorithms Used in Data Mining[J]. Journal of Electronics & Information Technology, 2005, 27(4): 655-662.
- [17] PILANIA G. Machine Learning in Materials Science: From Explainable Predictions to Autonomous Design[J]. Computational Materials Science, 2021, 193: 110360.
- [18] YE D D, WANG W Z, ZHOU H T, et al. Characterization of Thermal Barrier Coatings Microstructural Features Using Terahertz Spectroscopy[J]. Surface and Coatings Technology, 2020, 394: 125836.
- [19] CAO B H, CAI E Z, FAN M B. NDE of Discontinuities in Thermal Barrier Coatings with Terahertz Time-Domain Spectroscopy and Machine Learning Classifiers[J]. Materials Evaluation, 2021, 79(2): 125-135.
- [20] GUO S. Young's Moduli of Zirconia Top-Coat and Thermally Grown Oxide in a Plasma-Sprayed Thermal Barrier Coating System[J]. Scripta Materialia, 2004, 50(11): 1401-1406.
- [21] WAN J, ZHOU M, YANG X S, et al. Fracture Characteristics of Freestanding 8wt% Y_2O_3 - ZrO_2 Coatings by Single Edge Notched Beam and Vickers Indentation Tests[J]. Materials Science and Engineering: A, 2013, 581: 140-144.
- [22] GUO S Q, KAGAWA Y. Effect of Loading Rate and Holding Time on Hardness and Young's Modulus of EB-PVD Thermal Barrier Coating[J]. Surface and Coatings Technology, 2004, 182(1): 92-100.

- [23] HASS D D, SLIFKA A J, WADLEY H N G. Low Thermal Conductivity Vapor Deposited Zirconia Microstructures[J]. *Acta Materialia*, 2001, 49(6): 973-983.
- [24] GOLDSTEIN D R. Analyzing Microarray Gene Expression Data[J]. *Journal of the American Statistical Association*, 2005, 100(472): 1464-1465.
- [25] YU J X, GUO S, CHEN Y C, et al. A Two-Stage Predicting Model for γ' Solvus Temperature of L12-Strengthened Co-Base Superalloys Based on Machine Learning[J]. *Intermetallics*, 2019, 110: 106466.
- [26] YU J X, WANG C L, CHEN Y C, et al. Accelerated Design of L12-Strengthened Co-Base Superalloys Based on Machine Learning of Experimental Data[J]. *Materials & Design*, 2020, 195: 108996.

(上接第 207 页)

- [18] 郭芳威, 张瑞吉, 邢辰, 等. 层级孔喷涂粉末构筑及新一代长寿命热障涂层材料的研究进展[J]. *航空材料学报*, 2023, 43(4): 1-16.
- GUO F W, ZHANG R J, XING C, et al. Review on Thermal Spraying Powder with Hierarchy Pore Structure and a New Generation of Long-Life Thermal Barrier Coating Materials[J]. *Journal of Aeronautical Materials*, 2023, 43(4): 1-16.
- [19] 殷举航. 基于等离子喷涂技术的 YSZ 涂层沉积机理和性能研究[D]. 成都: 电子科技大学, 2023.
- YIN J H. Study on Deposition Mechanism and Properties of YSZ Coating Based on Plasma Spraying Technology [D]. Chengdu: University of Electronic Science and Technology of China, 2023.
- [20] 李成新, 刘森辉, 张惠宇, 等. 新型大气长层流等离子体喷涂方法和研究进展[J]. *中国表面工程*, 2019, 32(6): 1-19.
- LI C X, LIU S H, ZHANG H Y, et al. An Introduction and Progress of a Novel Atmospheric Laminar Plasma Spray Method[J]. *China Surface Engineering*, 2019, 32(6): 1-19.
- [21] 杨晖, 李根. 等离子喷涂射流对飞行粒子的影响[J]. *焊接技术*, 2008, 37(5): 1-4.
- YANG H, LI G. Influence of Plasma Spraying Jet on Flighting Particles[J]. *Welding Technology*, 2008, 37(5): 1-4.
- [22] 朱建峰, 郑允宅, 曹萍丽, 等. 等离子喷涂射流的三维非稳态数值模拟[J]. *机械工程材料*, 2015, 39(8): 98-102.
- ZHU J F, ZHENG Y Z, CAO P L, et al. Three Dimensional Transient Numerical Modeling of Plasma Jet[J]. *Materials for Mechanical Engineering*, 2015, 39(8): 98-102.
- [23] LENG K, RINCON ROMERO A, HUSSAIN T. Multilayer GZ/YSZ Thermal Barrier Coating from Suspension and Solution Precursor Thermal Spray[J]. *Journal of the European Ceramic Society*, 2023, 43(11): 4991-5003.
- [24] 李旭强, 李文生, 翟海民, 等. Fe 基非晶涂层厚度与其爆炸喷涂沉积特性及性能[J]. *表面技术*, 2023, 52(5): 140-148.
- LI X Q, LI W S, ZHAI H M, et al. Effect of Coating Thickness on Fe-Based Amorphous Detonation Spraying Deposition Characteristics and Properties[J]. *Surface Technology*, 2023, 52(5): 140-148.
- [25] MA W, DONG H Y, GUO H B, et al. Thermal Cycling Behavior of $\text{La}_2\text{Ce}_2\text{O}_7/8\text{YSZ}$ Double-Ceramic-Layer Thermal Barrier Coatings Prepared by Atmospheric Plasma Spraying[J]. *Surface and Coatings Technology*, 2010, 204(21/22): 3366-3370.
- [26] 张帅, 董霞, 王恪典, 等. 搭接率对激光重熔氧化锆涂层结构及热震性能的影响[J]. *西安交通大学学报*, 2018, 52(10): 72-79.
- ZHANG S, DONG X, WANG K D, et al. Effect of Overlap Rate on Microstructure and Thermal Shock Properties of Laser Remelted Ytria Stabilized Zirconia Coating[J]. *Journal of Xi'an Jiaotong University*, 2018, 52(10): 72-79.