

doi: 10.3969/j.issn.1001-3849.2026.02.011

# 基于可解释性机器学习的铸造铝硅合金成分-工艺 耦合机制建模

刘芳宁, 孙瑞侠, 王越, 赵晋

(中国航发北京航空材料研究院, 北京 100095)

**摘要:** 铝硅系铸造合金因其良好的高温性能与铸造成形能力, 被广泛应用于航空发动机热端部件。为深入理解成分与工艺参数对力学性能的耦合影响, 并提升传统经验模型的预测能力, 提出了一种基于可解释性机器学习的建模方法。研究基于 378 组实验数据, 构建了涵盖 Si、Cu、Mg、Mn、Zn 等成分变量及固溶处理方式、冷却方式、时效温度等工艺参数的综合数据集。分别训练并对比了极限梯度提升(XGBoost)、随机森林回归(RF)、支持向量回归(SVR)和 K-最近邻回归(KNR) 4 种模型, 并通过交叉验证评估其在抗拉强度与延伸率预测中的性能表现。结果表明, 极限梯度提升模型在 3 项性能指标上均优于其他模型, 其中抗拉强度的决定系数达 0.87, 平均绝对误差(MAE)为 10.34 MPa, 均方根误差(RMSE)为 7.99 MPa; 延伸率的决定系数为 0.95, 平均绝对误差为 0.4%, 均方根误差为 0.65%。进一步通过 SHAP 方法分析特征贡献及交互作用发现, Mg 和 Cu 的强化效应均受时效温度调控, 表现出与传统材料学中析出强化机制一致的非线性规律。结合局部可解释模型无关方法(LIME)进行局部解释验证后, 模型在个体样本层面亦展现出良好的稳定性与一致性, 进一步确认了本研究在构建可解释性预测模型及揭示成分-工艺协同机制方面的有效性。

**关键词:** 机器学习; 极限梯度提升; 沙普利加和解释; 局部可解释模型无关方法; 铝硅合金

中图分类号: TG136, TQ050.4 文献标志码: A

## Interpretable machine learning-based modeling of composition-processing interaction in cast Al-Si alloys

LIU Fangning, SUN Ruixia, WANG Yue, ZHAO Jin

(Beijing Institute of Aeronautical Materials, Beijing 100095, China)

**Abstract:** Cast Al-Si alloys are widely used in hot-section components of aircraft engines due to their excellent high-temperature performance and castability. To better understand the coupled effects of composition and processing parameters on mechanical properties and improve the predictive capability of traditional empirical models, this study proposes an interpretable machine learning-based modeling approach. A dataset comprising 378 experimental records was compiled, incorporating compositional variables such as Si, Cu, Mg, Mn, and Zn, as well as processing parameters including solution treatment method, cooling method, and aging temperature. Four regression models, including extreme gradient boosting (XGBoost), random forest (RF), support vector regression (SVR) and K-nearest neighbors regression (KNR) were trained and evaluated using cross-validation to assess their

收稿日期: 2025-07-23 修回日期: 2025-09-02

通信作者: 刘芳宁(1991—), 女, 硕士, 高级工程师, 研究方向为材料机器学习, e-mail: lfn2015@163.com

基金项目: 国家科技重大专项经费资助(J2019-VI-0008-0122)

引用信息: 刘芳宁, 孙瑞侠, 王越, 等. 基于可解释性机器学习的铸造铝硅合金成分-工艺耦合机制建模[J]. 电镀与精饰, 2026, 48(2): 94-104.

LIU Fangning, SUN Ruixia, WANG Yue, et al. Interpretable machine learning-based modeling of composition-processing interaction in cast Al-Si alloys[J]. Plating and Finishing, 2026, 48(2): 94-104.

performance in predicting ultimate tensile strength (UTS) and elongation (EL). Results show that the XGBoost model outperform others across all 3 evaluation metrics. Specifically, the coefficient of determination ( $R^2$ ) for UTS reaches 0.87, with a mean absolute error (MAE) of 10.34 MPa and a root mean square error (RMSE) of 7.99 MPa; for EL, the  $R^2$  is 0.95, with an MAE of 0.4% and an RMSE of 0.65%. Further analysis using shapley additive explanations (SHAP) method reveal that the strengthening effects of Mg and Cu are both regulated by aging temperature, exhibiting nonlinear trends that align with known precipitation strengthening mechanisms in traditional materials science. Local interpretable model-agnostic explanations (LIME) method is also applied for local interpretability verification, demonstrating strong consistency and stability at the individual sample level. These results confirm the effectiveness of the proposed interpretable modeling approach in both property prediction and revealing the underlying composition-process synergy in cast Al-Si alloys.

**Keywords:** machine learning; XGBoost; SHAP; LIME; Al-Si alloy

铸造铝合金因其优异的流动性、高比强度以及对复杂构件形状的良好适应性,已成为航空航天与汽车发动机电镀涂料等领域的重要结构材料<sup>[1-4]</sup>。其中,Al-Si系铸造合金凭借良好的铸造性能和综合力学表现,在飞机结构件及航空发动机的机匣、舱门骨架、窗框类构件等关键部位中得到了广泛应用<sup>[5]</sup>。合金元素之间的协同作用对其力学性能具有决定性影响:Si元素通过形成共晶硅相提升铸造性,而Mg和Cu元素则分别通过固溶强化与析出强化机制增强材料强度<sup>[6]</sup>。除了合金成分本身,热处理制度对组织与性能的调控也起着关键作用。已有研究表明,T6热处理可通过调控 $\beta(\text{Mg}_2\text{Si})$ 析出相的长径比,显著提高合金的疲劳裂纹扩展抗力<sup>[7]</sup>。此外,铸造工艺参数如冷却速率、固溶温度等往往与合金成分产生耦合作用,对组织演化路径和力学响应产生复合作用。在典型的铸造Al-Si合金如A356中,邱瑾等<sup>[8]</sup>指出,当冷却速率低于3 °C/s时,易形成粗大板状共晶硅相,显著降低延伸率,而T6热处理可通过促进 $\text{Mg}_2\text{Si}$ 析出和硅相球化,有效提升强度与塑性。然而,传统的铸造铝硅系合金材料设计方法主要依靠大量实验尝试与经验累积,通常通过单因素或有限变量组合的逐步优化,难以有效处理成分与工艺参数之间的高维复杂交互作用。具体而言,Al-Si合金体系中,合金元素(如Mg、Cu)含量、热处理工艺(固溶温度、时效温度、冷却速率等)以及力学性能之间存在高度的非线性关联关系,传统实验方法难以明确、系统地揭示这些因素的交互机制。此外,逐一实验尝试的策略不仅实验周期冗长、成本高昂,且难以在多因素条件下快速、精准地确定最佳组合方案,限制了对性能最优的成分与工艺设计的有效探索。

近年来,数据驱动的机器学习技术为材料性能

预测开辟了创新性研究范式,其通过挖掘多维数据中的非线性关联,显著提升了传统经验模型的预测能力<sup>[9]</sup>。在众多算法中,随机森林(Random Forest, RF)凭借其集成学习特性,通过构建多棵去相关决策树实现对特征空间进行高效划分,有效降低过拟合风险并提升泛化能力。研究表明,随机森林模型在变形铝合金中对抗拉强度(Ultimate Tensile Strength, UTS)和延伸率(Elongation, EL)的预测误差率可低至11%和14%<sup>[10]</sup>。支持向量机(Support Vector Machine, SVM)则通过核函数将低维非线性问题映射至高维空间,利用在高维空间中构建最优间隔超平面,从而实现分类或回归任务,特别适用于小样本条件下的材料性能预测。例如,有研究采用SVM模型对Al-Zn-Mg-Cu系新型高强度铝合金抗拉强度进行建模,结果与实验值高度一致,验证了其在复杂材料性能预测中的应用潜力<sup>[11]</sup>。K-最近邻回归(K-Nearest Neighbor Regression, KNR)作为一种非参数化算法,通过计算相似样本的加权平均值实现预测,对数据分布没有先验假设,对异常值不敏感,因此在小样本数据中表现出良好的适用性<sup>[12]</sup>。此外,极限梯度提升(XGBoost)通过构建多层次的提升树结构,能够处理不同特征尺度与数据结构的异质性,通过梯度提升机制显著提升预测的准确性和效率,在材料科学中尤其对复杂的相互作用和非线性关系进行有效建模,其在材料性能预测中通常能达到较高的预测精度和解释力,北京航空航天大学的一项研究通过机器学习对铝合金的抗拉强度进行预测建模,其 $R^2$ 低于0.914<sup>[13]</sup>。

目前机器学习预测材料性能的主要挑战之一在于“黑箱”特性,即尽管模型能够实现高精度预测,但难以解释其决策机制,这限制了其在材料设计中的应用价值。为解决这一问题,SHAP(Shapley

Additive Explanations)方法应运而生,该方法基于博弈论的Shapley值理论,能够量化各特征对预测结果的边际贡献,从而实现全局与局部可解释性<sup>[14]</sup>。研究表明,SHAP值分析可根据影响合金综合性能的重要性对高强高韧铝合金关键特征量进行排序,从而筛选出有利于提升合金综合性能的候选合金元素<sup>[15]</sup>。

LIME(Local Interpretable Model-agnostic Explanations)通过构建局部代理模型,以线性近似方式解释复杂模型的个体预测。其核心思想是在特定数据点附近生成一个简单的可解释模型,通过对该局部区域的采样和分析,近似复杂模型在该点的预测行为。这种方法的优势在于其模型无关性,能够适用于多种机器学习算法,同时通过局部线性化提供直观的解释结果。这两种方法的协同应用,为构建“白箱化”材料性能预测模型提供了方法论基础<sup>[16]</sup>。

本研究提出了一种面向铸造Al-Si系合金性能预测的可解释性机器学习框架,以定量分析合金成分和热处理工艺对力学性能的非线性影响,特别是针对传统实验方法难以明确解析的成分与工艺之间复杂的非线性协同效应,提出了一种能够量化特征贡献、明确揭示特征交互作用机制的解释性分析方法,为材料设计中的工艺优化提供明确、可信的数据支持与理论依据,并为材料设计中的工艺优化提供数据和方法支持。基于数据库和文献数据,采用前述4种算法的回归方法构建了抗拉强度和延伸率的预测模型,并借助贝叶斯优化和交叉验证选出表现最佳的XGBoost模型用于进一步分析。在模型解释阶段,采用SHAP方法量化各特征的边际贡献,重点探讨了Mg和Cu在不同时效温度下的性能贡献特征。结果表明,Mg和Cu强化效应受到时效温度调控,呈现出明显的非线性规律;特别是中高温区的时效处理对Mg和Cu性能贡献影响显著。此外,通过SHAP交互作用分析,进一步揭示了成分与工艺变量之间协同效应和规律性。然后,为进一步验证SHAP分析结果在样本层面的稳定性并解析合金元素在不同温区下的强化变化趋势,基于LIME分析绘制了Mg与Cu对抗拉强度的局部贡献图,结果显示,两者LIME贡献趋势与SHAP交互图高度一致,同时揭示了温区内强化机制的动态演变过程,进一步提升了模型解释的可信度和实际应用价值。

## 1 实验

### 1.1 数据准备

为实现铸造铝硅系合金的力学性能精准预测,

本研究建立了包含378组实验数据的综合数据集。该数据集来源于公开数据库和文献报道<sup>[11,17-23]</sup>,涵盖了两大类输入变量:成分变量包括Si、Cu、Mg、Mn、Zn含量,工艺变量包括固溶处理方式(Solution Treatment Method, Sol. Treated)、固溶温度(Solution Treatment Temperature, Sol. Temp)、固溶保温时间(Solution Treatment Holding Time, Sol. Time)、时效温度(Aging Temperature, Age. Temp)、时效时间、冷却方式(Cooling Type, Cool. Type),输出变量包括室温下的抗拉强度与延伸率。

为减少样本排序对模型训练的潜在影响,首先对原始数据进行随机化处理,打乱样本顺序,以提升模型训练的代表性与泛化能力。同时为降低特征量纲对模型训练的影响,对所有连续变量采用Z-score标准化处理,计算公式如下:

$$x' = \frac{x - \mu}{\sigma} \quad (1)$$

式中: $x$ 为原始特征值, $\mu$ 为该特征在训练集中的均值, $\sigma$ 为标准差, $x'$ 为标准化后的值。

分类变量采用数值编码方式转换为整数型,以确保各类机器学习算法的兼容性。在缺失值处理方面,考虑到不同模型对缺失数据的适应能力不同,分别采用表1所示策略。其中,XGBoost模型对连续变量和分类变量的缺失值均采用内置机制处理,其余模型则采用了K-近邻插值法进行补充。

表1 填充策略

Tab.1 Filling strategy

特征类型	XGBoost 策略	SVR/KNR/R 策略
连续变量	使用 NaN(由模型处理)	KNN 插值
离散变量	使用 NaN(由模型处理)	KNN 插值

### 1.2 方案设计

本研究使用Python编程语言实现数据建模与可解释性分析,主要依赖的工具库包括scikit-learn、XGBoost、SHAP和LIME。模型训练阶段,选用4种常用的回归算法:RF、支持向量回归(SVR)、KNR和XGBoost。选择这4类模型的原因在于:它们分别代表了集成学习中的Bagging与Boosting方法、核方法以及非参数回归方法,具有较强的代表性,并能有效处理成分-工艺-性能之间的非线性与多变量交互特征;此外,RF与XGBoost易于与SHAP、LIME等可解释性方法结合,可从全局与局部层面揭示特

征作用机制;同时,这些方法在材料信息学领域应用成熟、计算效率高,便于复现与工程推广。其他算法如KNN、LightGBM、Gaussian Process等在初步试验中虽有一定效果,但在可解释性或计算成本上未优于所选模型,因此未纳入最终对比。

在获取最优模型性能方面,采用贝叶斯优化算法对各模型超参数进行搜索,同时结合K折交叉验证对模型稳定性进行评估。数据集按80%和20%的比例划分为训练集与测试集,所有性能评价指标均基于测试集结果进行计算。为保证对比公平性,本研究在不同预测任务(抗拉强度、延伸率)中保持相同的贝叶斯优化全局参数,主要区别体现在不同算法的搜索空间大小上:对参数数量较多、搜索空间更复杂的XGBoost与RF设定50次迭代(前10次为随

机采样),对参数较少的SVR与KNR设定40次迭代(前8次为随机采样),其余采集函数、代理模型及提前停止阈值保持一致,表2为各模型的主要贝叶斯优化参数。

为全面衡量模型性能,本文选取3项常用的回归评估指标。平均绝对误差(MAE)用于衡量预测值与实际值之间的平均偏差,值越小说明整体误差越低;均方根误差(RMSE)对较大误差更为敏感,反映模型在极端样本下的稳健性;决定系数( $R^2$ )表示模型对目标变量波动的解释能力,值越接近1说明模型拟合效果越好。各模型的主要超参数和调优范围如表3所示。最终,XGBoost模型在3项性能指标上均表现最优,因此被选为后续SHAP与LIME分析的基础模型。

表2 各模型的主要贝叶斯优化参数

Tab.2 Main Bayesian optimization parameters for each model

模型名称	迭代次数	采集函数	代理模型	收敛条件
XGBoost	50(前10次随机采样)	期望改进(Expected Improvement, EI)	RBF核	连续5次提升<0.001则提前终止
SVR	50(前10次随机采样)	期望改进	RBF核	连续5次提升<0.001则提前终止
RF	40(前8次随机采样)	期望改进	RBF核	连续5次提升<0.001则提前终止
KNR	40(前8次随机采样)	期望改进	RBF核	连续5次提升<0.001则提前终止

表3 各模型使用的主要超参数和调优范围

Tab.3 Key hyperparameters and tuning ranges used by each model

模型名称	超参数	描述	搜索范围
XGBoost	n_estimators	弱学习器数量	[50, 300]
	learning_rate	学习率	[0.01, 0.3]
	max_depth	每棵树的深度	[3, 10]
	subsample	子样本比例	[0.5, 1.0]
	colsample_bytree	每棵树的特征采样比例	[0.5, 1.0]
SVR	Kernel	核函数类型	{'linear', 'rbf'}
	C	惩罚系数	[0.1, 10]
	epsilon	损失函数中的 $\epsilon$	[0.01, 1.0]
RF	n_estimators	决策树数量	[50, 300]
	max_depth	每棵树的深度	[None, 5-20]
	min_samples_split	拆分节点所需的最小样本数	[2, 10]
KNR	n_neighbors	邻居数量	[3, 20]
	weights	权重函数	{'uniform', 'distance'}
	p	距离度量方式	{'Manhattan', 'Euclidean'}
	algorithm	邻居搜索方法	{'auto', 'ball_tree', 'kd_tree', 'brute'}
	leaf_size	树叶节点大小	[10, 100]

为进一步揭示铝硅合金中“工艺+成分”的协同作用机制，本研究基于SHAP值引入交互作用分析，从特征交互维度量化工艺变量对合金元素强化效果的调控能力。具体包括：生成全体样本的SHAP值，并呈现各特征的贡献排序与分布；绘制SHAP交互作用图，分别分析时效温度对Mg和Cu强化贡献的调控关系。SHAP值的计算基于以下公式：

$$\phi_i = \sum_{S \subseteq N \setminus \{i\}} \frac{|S|!(|N|-|S|-1)!}{|v|!} [f(S \cup \{i\}) - f(S)] \quad (2)$$

式中： $\phi_i$ 表示特征*i*的Shapley值，*S*为特征集合*N*中除去*i*的任意子集，*f*(*S*)表示模型在特征子集*S*下的预测输出。该公式可衡量特征在不同组合中对模型输出的平均边际贡献。LIME方法具有模型无关性，适用于任意黑箱模型。LIME的优化目标可表示为：

$$\xi(x) = \arg \min_{g \in G} L(f, g, \pi_x) + \Omega(g) \quad (3)$$

式中：*f*表示原始复杂模型，*g*是可解释模型(如线性

模型)，*L*为局部区域内的预测差异损失函数， $\pi_x$ 表示扰动样本与原样本的距离权重函数， $\Omega(g)$ 为模型复杂度惩罚项。

在本研究中，样本按照时效温度划分为低温(170~180 °C)、中温(180~230 °C)、中高温(230~250 °C)和高温(>250 °C)区间，并在每个温区中选取具有代表性的测试样本。优先考虑模型预测误差低于10 MPa样本，以保证解释基于较高置信度的预测结果。在特征分布方面，通过统计各温区内主要成分变量(如Mg、Cu)的分布特征，优先选取接近区间均值或中位数的样本，以增强代表性并避免异常值干扰。

随后，汇总各温区样本对UTS的LIME局部贡献，绘制Mg与Cu在不同温度条件下的贡献趋势图。该方法不仅在局部层面对SHAP全局分析结果进行了验证，也揭示了成分与工艺在热处理过程中的协同机制演化，进一步提升了模型解释的深度与应用价值。本研究的整体框架图如图1所示。

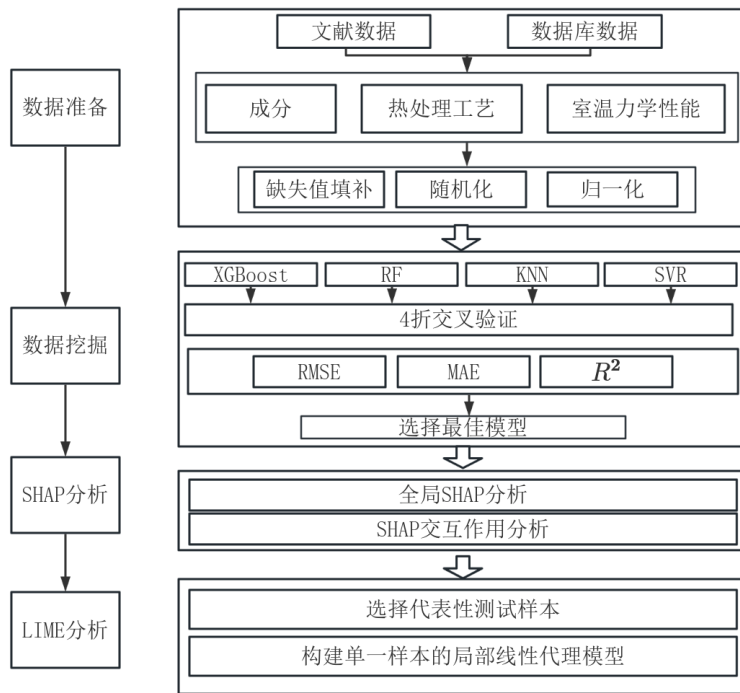


图1 整体框架

Fig.1 Overall framework of this study

## 2 结果与讨论

### 2.1 模型选择

4种不同模型对抗拉强度的预测结果分别如图2所示，通过对比可知，不同模型在预测精度和稳定性上存在明显差异。从整体趋势看，XGBoost模型

的预测点最为集中且接近理想对角线，表明其在多数样本上具有较高的拟合能力和稳定性。相比之下，RF模型在高强度区间(>210 MPa)同样表现较好，但在中低强度区间出现一定程度的预测偏差，部分样本预测值明显低于真实值。SVR模型虽然能

够较好地覆盖整个强度区间,但点的离散程度相对较大,部分预测点偏离对角线较远,说明模型在某些区间泛化能力有限。KNN模型的预测结果则最为

分散,尤其在低强度区间(<180 MPa)误差较大,表现出明显的欠拟合现象,说明该模型难以捕捉复杂非线性关系。

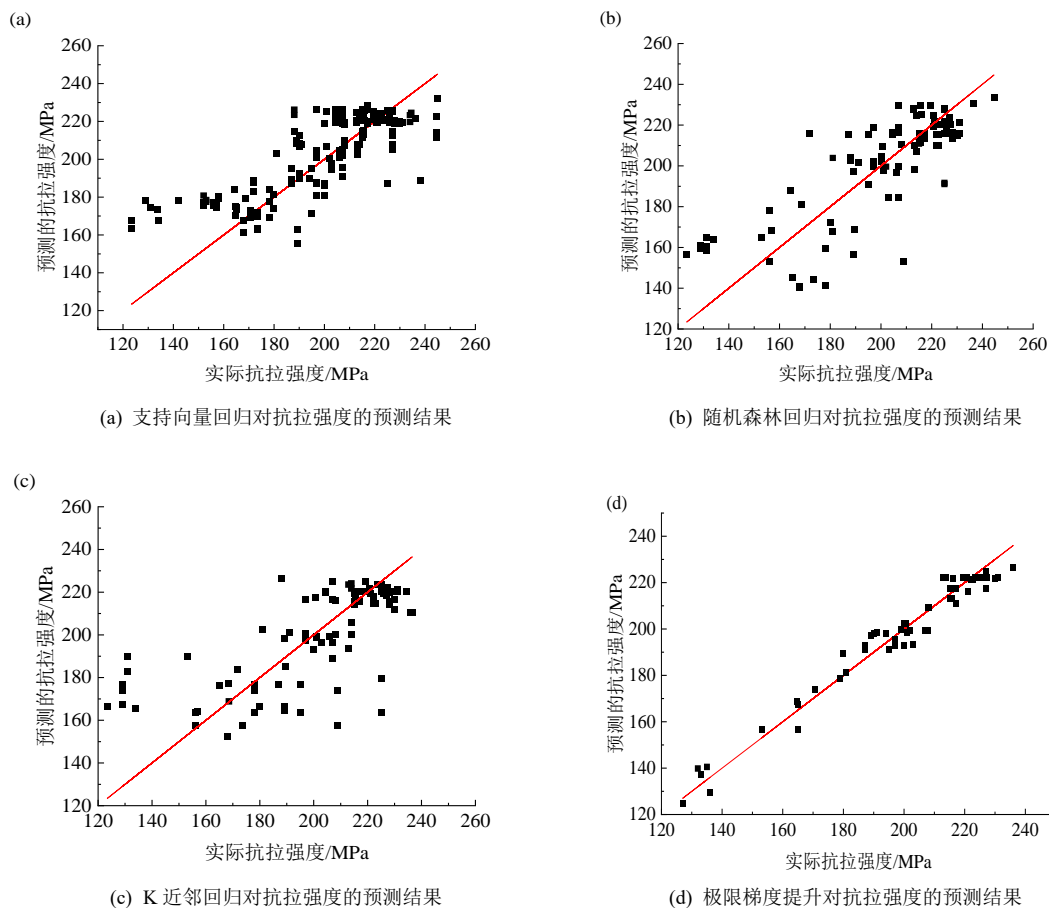


图2 4种模型对抗拉强度的预测结果

Fig.2 Prediction results of tensile strength by four models

4种模型对延伸率的误差分析结果如图3所示。其中, XGBoost的散点最为集中,尤其在主要延伸率区间(约2%~5%)内,绝大多数预测点靠近对角线,反映出良好的拟合能力。RF次之,整体趋势较为一致,但在低延伸率区间(<2%)预测偏差较大,存在一定的系统性低估。SVR在多个区间的预测出现较大离散,部分预测值远离实际值,说明其对延伸率的非线性特征拟合能力有限。KNN的预测结果分布最为分散,误差较为明显,尤其在边缘区间(<1%与>4%)中点离对角线较远,显示出对极端样本的适应性不足。

整体来看, XGBoost算法在延伸率预测中仍具有相对最优的综合性能,其次为RF算法,而KNN与SVR在该指标上的表现存在明显局限性。

图4展示了XGBoost、SVR、RF及KNN模型在抗

拉强度预测中的性能对比。从结果看, XGBoost模型在3项指标中均表现最佳,其MAE与RMSE分别为7.99 MPa与10.34 MPa,  $R^2$ 达0.87,说明其具备良好的拟合能力与泛化能力。KNN模型的误差最大,  $R^2$ 仅为0.49,预测精度不理想。整体而言, XGBoost更适合用于铝硅合金抗拉强度的建模预测。

在延伸率预测中,各模型整体性能提升,从图5中可看出, XGBoost依然保持领先,其 $R^2$ 达0.95, RMSE仅为0.65%,显示出较高的拟合准确性。SVR与KNN模型分别取得了 $R^2$ 为0.89和0.88,说明在延伸率这类分布相对连续、非线性波动不大的特征下,这些模型均具备良好的表达能力。RF模型尽管在抗拉和屈服强度上表现尚可,但在延伸率预测中误差较大, RMSE为0.94%,提示其对小幅度数值变化的捕捉能力有限。

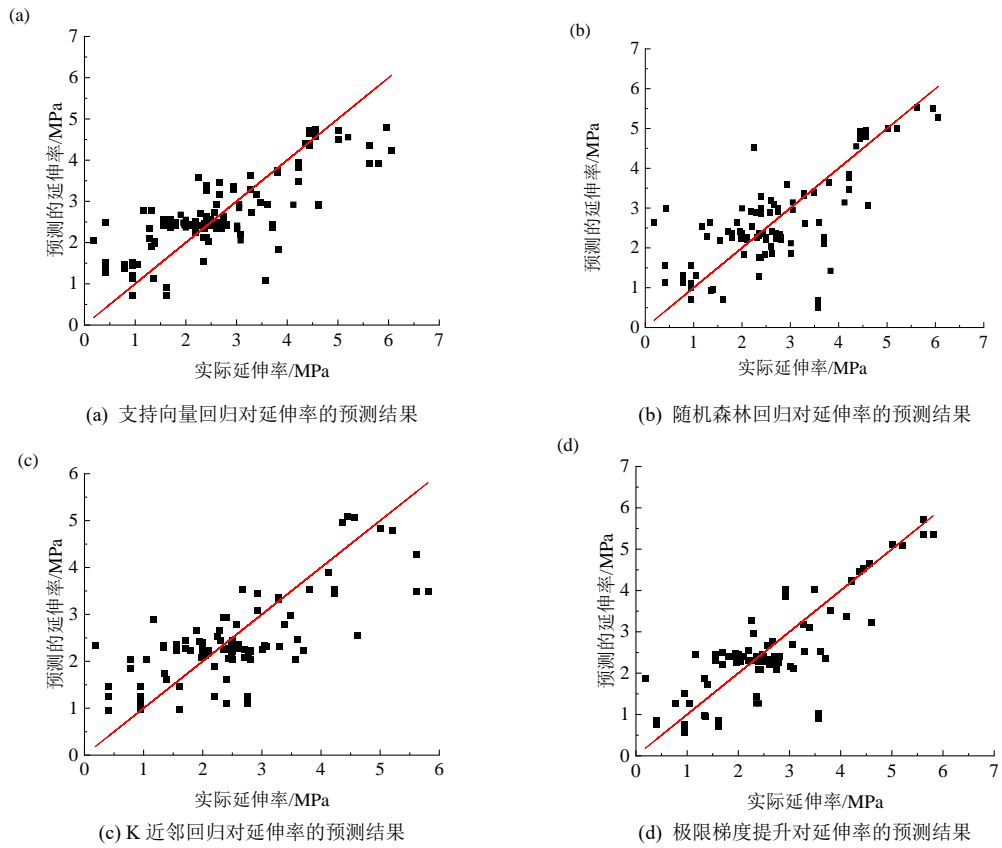


图 3 4 种模型对延伸率的预测结果

Fig.3 Prediction results of elongation by four models

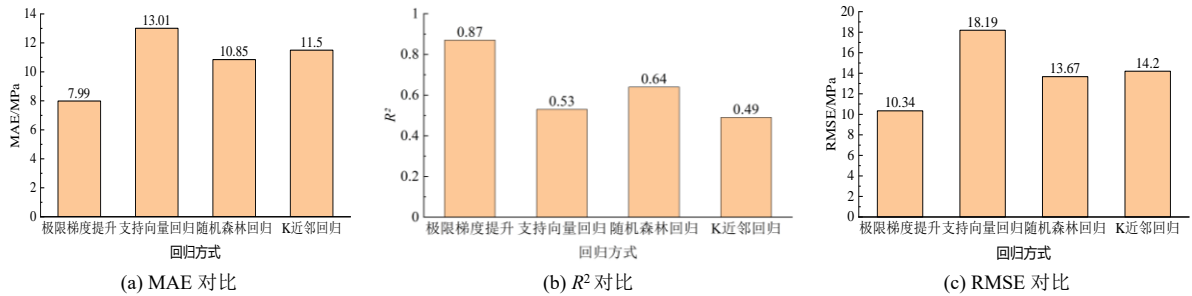


图 4 4 种模型对抗拉强度预测结果的误差分析对比

Fig.4 Performance evaluation of four models for tensile strength prediction

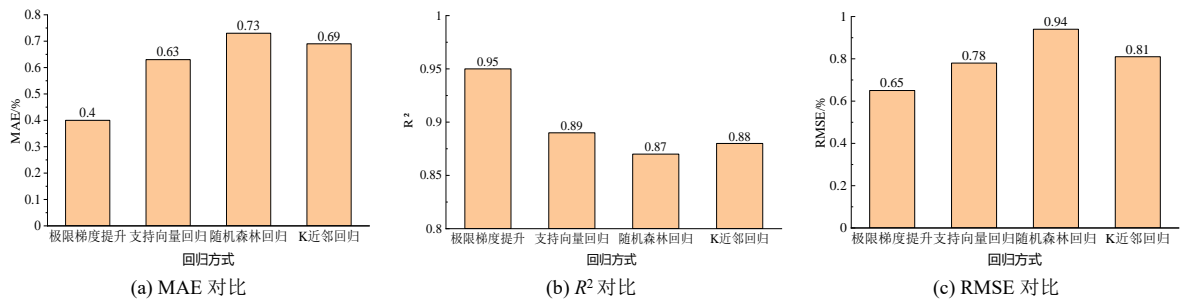


图 5 4 种模型对延伸率预测结果的误差分析对比

Fig.5 Performance evaluation of four models for elongation prediction

XGBoost模型的最优参数通过贝叶斯搜索结合交叉验证确定,如表4所示。模型在n\_estimators为100、learning\_rate为0.01、max\_depth为3的设置下表现最佳,表明较浅的树结构有助于防止过拟合。同时,subsample和colsample\_bytree均为0.8,说明在训练过程中引入一定的随机性有助于提升模型的泛化能力。整体而言,该参数组合在保证模型精度的同时有效控制了复杂度。不同模型性能差异反映了其算法特性与材料数据结构的匹配程度,其中XGBoost凭借其梯度提升机制,在捕捉材料成分-工艺-性能间的复杂非线性关系方面表现出明显优势。

表4 XGBoost模型的最优参数

Tab.4 Optimal hyperparameters of the XGBoost model

超参数	值
n_estimators	100
learning_rate	0.01
max_depth	3
subsample	0.8
colsample_bytree	0.8

## 2.2 SHAP 特征重要性与交互作用分析

各元素和工艺条件对铝硅合金力学性能的影响具有显著差异性。图6是各主要元素和工艺条件对力学性能SHAP重要性的总体解释图,对UTS而言, Si、Cu和Mg含量是主要贡献变量,高含量的Si和Cu普遍表现出较强的正向贡献,这与它们形成强化相并增强晶界强度的机制密切相关, Cu元素强化效应通常依赖于 $\theta'(Al_2Cu)$ 等析出相在基体中的弥散析出,这些强化相能够显著提升合金的抗拉强度;

Mg的强化作用则可能通过与Si形成 $Mg_2Si$ 沉淀相实现。此外,热处理条件如时效温度对强度贡献也较为显著,这体现了析出强化的关键作用。相反,延伸率的SHAP结果表明, Si、Cu等强化元素的高含量对合金塑性具有明显的负面影响,表现为红色高值对应负向SHAP值,这与强化相过量析出及晶界脆性相形成引起塑性降低的理论相符。与此同时,适当的固溶处理温度和冷却速率表现出对EL的有利贡献,揭示了通过调控热处理工艺可缓解强化元素对塑性的负面影响。然而,上述分析主要揭示了单个特征对性能的独立贡献,未考虑元素与工艺之间可能存在的复杂交互作用。为深入理解成分与工艺因素协同影响铝硅合金性能的机理,本文进一步开展了SHAP交互作用分析,选取Si、Mg、Cu含量与时效温度作为代表特征,分别探讨其在力学性能预测中的交互影响关系。

图7采用等值线展示了时效温度与Mg含量对UTS的交互影响,红色区域代表显著的正向贡献,蓝色区域则为强化效果较弱的区间。具体而言,在较高温度( $>220\text{ }^\circ\text{C}$ )且Mg质量分数低于0.2%时,析出相的形成更为充分,抗拉强度得到明显提升;而在中等温度( $190\sim 210\text{ }^\circ\text{C}$ )且Mg质量分数约0.3%~0.7%时,可能出现过多或过快的析出,导致强化效果下降;同样,在更低温度( $<190\text{ }^\circ\text{C}$ )下,如果Mg含量较高,析出并不充分,强化效果也会受限。总体来看,该分布规律与合金的析出强化机理相符,表明适宜的时效温度与Mg含量可促进形成弥散且稳定的 $Mg_2Si$ 析出相,显著提升力学性能,而温度与成分的不匹配则易导致强化作用减弱。

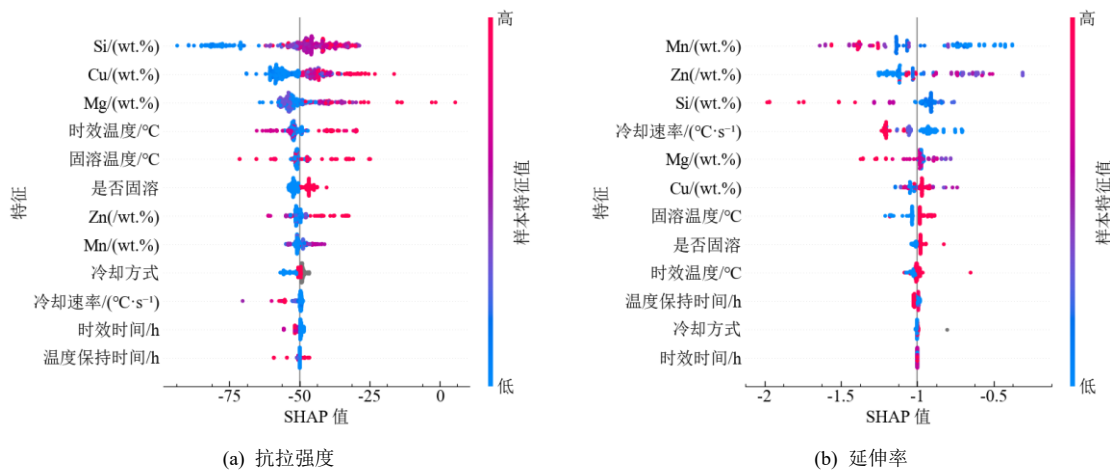


图6 SHAP 总体解释图

Fig.6 Overall SHAP summary plots

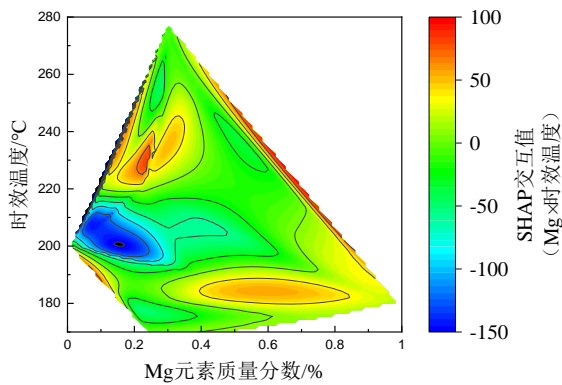


图7 Mg与时效温度对抗拉强度的SHAP热力图

Fig.7 SHAP interaction heatmap between Mg and aging temperature on UTS

图8展示了Cu含量与时效温度之间的SHAP交互作用对两种力学性能的影响。图8(a)的对UTS影响中，高Cu含量配合较高时效温度时的交互作用值显著增大，说明该组合对强化效果具有协同提升作用。图8(b)的对EL影响中则表现出非线性特征，高Cu+低温组合可能削弱塑性，而中等Cu+高温组合则有助于延伸率提升，反映出成分-工艺之间存在显著调控关系。

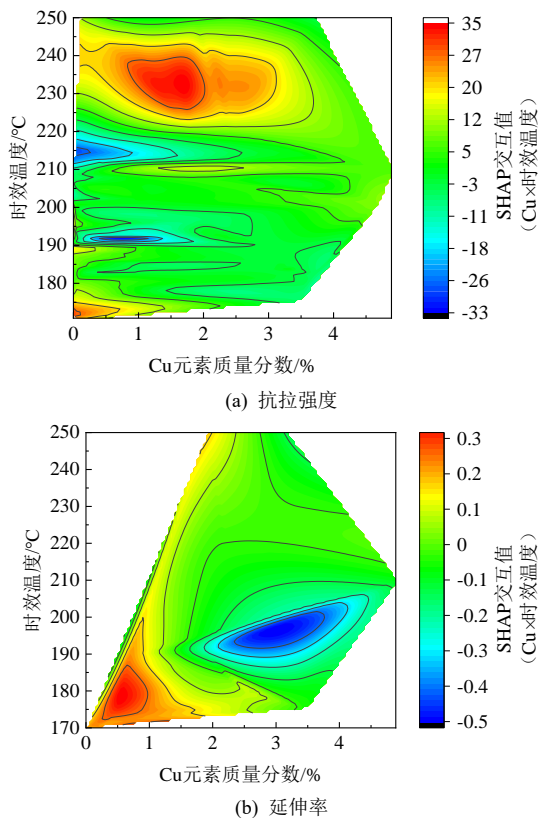


图8 Cu含量与时效温度的SHAP交互作用分析

Fig.8 SHAP interaction analysis for Cu and aging temperature

图9展示了Si含量与时效温度之间的SHAP交互作用对UTS的交互影响。该图显示，低温区(<180 °C)颜色以绿色至蓝色为主，SHAP值接近零或为负，说明沉淀不足，Si增加难以强化，甚至可能因脆性相增多而削弱性能。进入中温区(180~230 °C)，颜色迅速由绿色转为黄红且等值线密集，表明Si贡献显著且对温度高度敏感，与β''/β'弥散析出及与Mg协同形成Mg<sub>2</sub>Si的峰值时效机理一致。值得注意的是，在220~260 °C区间，颜色出现明显波动和快速变化，提示此阶段Si作用方向和幅度随温度微调即可发生显著变化，反映了接近峰值向过时效过渡时，沉淀相粗化与组织演化的敏感平衡。温度进一步升高至>260 °C时，颜色趋向绿色或蓝色，贡献下降，显示典型过时效特征。

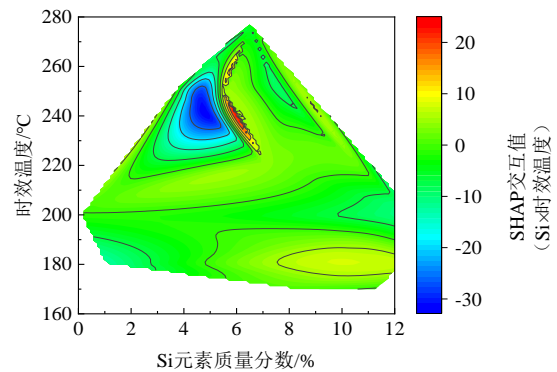


图9 Si含量与时效温度的SHAP交互作用分析

Fig.9 SHAP interaction analysis for Si and aging temperature

### 2.3 LIME 局部解释分析

为进一步验证SHAP全局分析的可靠性，并揭示成分在具体工艺条件下的实际贡献，本文引入LIME方法对典型样本进行了局部解释分析。图10展示了不同时效温度区间下，Mg对抗拉强度的LIME贡献。结果显示，Mg在低温区(170~180 °C)贡献显著为正，强化作用明显；中温区(180~230 °C)贡献转为负值，说明析出过快或粗化可能削弱其强化效果；在高温区(>230 °C)，Mg贡献再次转正，强化效应逐步恢复。该趋势与SHAP交互图高度一致，共同揭示了Mg与时效温度间的非线性协同关系，强调了优化热处理温度对发挥Mg强化作用的重要性。

图11展示了Cu在不同时效温度区间对抗拉强度的LIME局部贡献。结果表明，在低温区(170~180 °C)，Cu的贡献普遍为负，部分样本贡献值低于-90，表明此阶段Cu强化尚未发挥作用；随着温度升高至中温(180~230 °C)和中高温区(230~

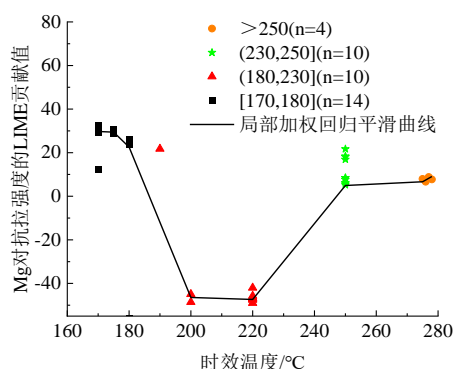


图10 不同时效温度区间下 Mg 含量对抗拉强度的 LIME 局部贡献趋势

Fig.10 LIME-based local contribution of Mg to UTS across aging temperature intervals

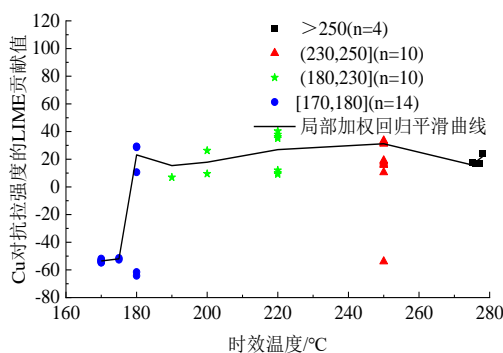


图11 不同时效温度区间下 Cu 对抗拉强度的 LIME 局部贡献趋势

Fig.11 LIME-based local contribution of Cu to UTS across aging temperature intervals

250 °C), Cu的贡献显著上升, 稳定维持在正值, 说明析出反应逐步进行, 强化效果增强; 在高温区 (>250 °C), Cu的贡献略有下降但仍保持正向, 表明其强化效应仍能维持但可能趋于饱和。这一趋势与图8(a)SHAP交互等高线图的全局分析高度一致。两图共同说明: Cu的强化作用依赖于较高的时效温度, 只有在充分的热处理条件下, Cu相的析出才能显著提升力学性能。

图12是不同温度区间下Si对抗拉强度的LIME局部贡献值分布。低温区(<180 °C)贡献值多为负或接近零, 与SHAP图中绿色至蓝色、贡献有限的特征一致。中温区(180~230 °C)整体贡献值偏高, 但分布存在明显波动, 部分样本为正、部分略为负, 反映了该区间对Si作用的高敏感性, 与SHAP图中等值线密集、颜色快速变化的敏感区相吻合。高温区 (>240 °C)贡献值普遍下降甚至转负, 对应SHAP图中颜色转绿或蓝的区域, 说明过时效导致强化相粗

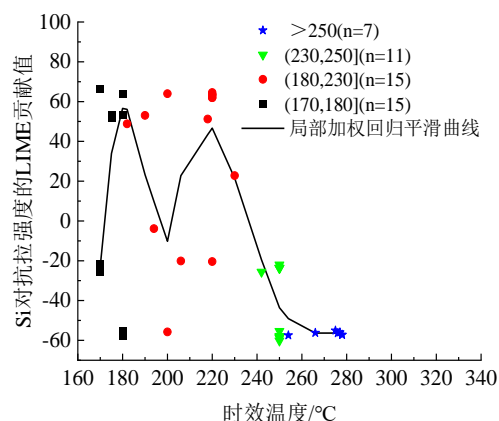


图12 不同时效温度区间下 Si 对抗拉强度的 LIME 局部贡献趋势

Fig.12 LIME-based local contribution of Si to UTS across aging temperature intervals

化、共晶硅长大而削弱性能。LIME的样本级波动为SHAP全局规律提供了细节验证, 也揭示了峰值时效区内Si作用易随工艺和成分微调而显著变化的特征, 有效弥补了SHAP全局分析无法精确解释单个样本预测机制的局限, 使模型预测在特定工艺条件下的解释更加清晰, 进一步提升了模型应用于实际工艺优化的可信度。

### 3 结论

基于已有铸造铝硅系合金数据, 采用机器学习方法对成分与工艺参数对力学性能的影响关系进行了系统拟合与分析。结果表明, 所建立的模型在揭示性能变化趋势时与现有材料研究经验及物理化学强化机理具有良好一致性, 进一步说明机器学习方法在该领域应用的合理性和科学基础。

(1) 本研究面向铝硅系铸造合金的力学性能建模问题, 构建了结合性能预测与机制解释的可解释性机器学习框架。通过对比SVR、RF、KNR和XGBoost回归模型并确定最佳参数, 建立成分、工艺和力学性能的关系预测模型。对4种模型的预测值误差分析表明, XGBoost在各项性能指标上表现最优, 具备良好的拟合精度和泛化能力, 为多变量作用规律的深入挖掘提供了稳定支撑。

(2) 在模型解释层面, 研究引入SHAP方法, 系统量化了成分与工艺变量对合金性能的边际贡献及其交互关系。结果表明, Si、Mg和Cu元素在不同时效温度条件下的性能贡献存在明显的非线性调控, 揭示了热处理工艺在强化机制中的调节作用, 这些趋势均与铸造铝硅合金析出相调控和强韧化

理论相吻合。相较于传统分析方法,该分析框架更有助于识别变量间的协同关系及其变化趋势。

(3) 为进一步验证模型解释的稳定性与物理一致性,研究结合LIME方法对典型样本进行了局部分析。在控制主要成分变量的前提下,比较不同时效温度下元素贡献的变化趋势,结果显示热处理工艺对关键元素的性能作用具有显著调节效应,且局部解释结果与全局分析趋势保持一致,表明模型能够有效反映成分与工艺的耦合效应。

综上,本研究构建的可解释性建模框架在提升预测能力的同时,拓展了数据驱动方法在材料性能机制解析中的应用方式。通过融合全局与局部解释工具,研究实现了成分-工艺-性能关系的建模与可视化分析,为基于机制理解的合金设计与工艺优化提供了可量化的支持路径,部分合金成分和工艺参数对后续电镀质量亦有潜在影响,为表面处理工艺优化提供参考。

## 参考文献

- [1] 禹露, 许培鑫, 罗志翔. A356 铝合金的表面改性与耐磨及耐蚀性能研究[J]. 电镀与精饰, 2024, 46(4): 29-37.
- [2] ZHU L, ZHANG Y, LUO Q, et al. Effectively refining Al-10Si alloy via Al-Ti-Nb-B refiner with Nb<sub>2</sub>O<sub>5</sub>[J]. Journal of Materials Science & Technology, 2024, 176(9): 204-210.
- [3] 吴忠. 汽车用 ZL101A 铝合金表面 Ni-Co 合金镀层的硬度[J]. 电镀与精饰, 2018, 40(11): 5-9.
- [4] YUN M, JUNG I-H. Development of a rapid solidification model for additive manufacturing process and application to Al-Si alloy[J]. Acta Materialia, 2024, 265: 119638.
- [5] 戴圣龙, 张坤, 杨守杰, 等. 先进航空铝合金材料与应用[M]. 北京: 国防工业出版社, 2012: 143-144.
- [6] 薛利文. 高强塑性 Al-Si 合金微观组织调控及强韧化机制[D]. 长春: 吉林大学, 2024.
- [7] CAI Q, MENDIS C L, CHANG I T H, et al. Effect of short T6 heat treatment on the microstructure and the mechanical properties of newly developed die-cast Al-Si-Mg-Mn alloys[J]. Materials Science and Engineering: A, 2020, 788: 139610.
- [8] 邱谨, 曹杨婧, 罗晓梅, 等. A356 铝合金挤压铸造凝固过程及热处理对其性能的影响[J]. 特种铸造及有色合金, 2024, 44(2): 189-197.
- [9] BAIRD S G, LIU M, SAYEED H M, et al. Data-driven materials discovery and synthesis using machine learning methods[G]//Reedijk J, Poeppelmeier K R. Comprehensive Inorganic Chemistry III. Amsterdam: Elsevier, 2023: 3-23.
- [10] FENG X, WANG Z, JIANG L, et al. Simultaneous enhancement in mechanical and corrosion properties of Al-Mg-Si alloys using machine learning[J]. Journal of Materials Science & Technology, 2023, 167(36): 1-13.
- [11] LU Z, KAPOOR I, LI Y, et al. Machine learning driven design of high-performance Al alloys[J]. Journal of Materials Informatics, 2024, 4: 19.
- [12] ARUNA D M, 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]// Proceedings of the 2020 International Conference on Smart Electronics and Communication (ICOSEC). Trichy: IEEE, 2020: 1576-1581.
- [13] FU K, ZHU D, ZHANG Y, et al. Predictive modeling of tensile strength in aluminum alloys via machine learning[J]. Materials, 2023, 16(22): 7236.
- [14] LUNDBERG S M, LEE S I. A unified approach to interpreting model predictions[J]. Advances in Neural Information Processing Systems, 2017, 30: 4765-4774.
- [15] 姜磊. 数据驱动的新一代高强高韧铝合金研究[D]. 北京: 北京科技大学, 2024.
- [16] RIBEIRO M T, SINGH S, GUESTRIN C. "Why should I trust you?": Explaining the predictions of any classifier[C] // Proceedings of the 22nd ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery and Data Mining. San Francisco: ACM, 2016: 1135-1144.
- [17] 张福全, 蒋安定, 何海琪. 发动机缸盖用铸造铝硅合金的成分优化与组织性能研究[J]. 湖南大学学报(自然科学版), 2013, 40(12): 84-89.
- [18] 蒋安定. 铸造铝硅合金成分优化及其组织性能研究[D]. 长沙: 湖南大学, 2013.
- [19] 李飞龙, 苏广才, 黄万鹏, 等. 改良铸造铝硅镁合金的成分优化设计[J]. 铝加工, 2011(3): 33-37.
- [20] 华雄飞. 微合金化对全铝发动机高强度铸造 Al-Si 合金性能和组织的影响[D]. 镇江: 江苏大学, 2010.
- [21] 雷健, 郑宇新, 袁序弟, 等. 轿车发动机缸盖铸态铝合金成分优化设计[J]. 特种铸造及有色合金, 2001(3): 24-25, 2.
- [22] 郑骥. 新型高强、高耐腐蚀铸造铝合金的研究[D]. 上海: 上海交通大学, 2015.
- [23] BYCZYNSKI G E, KIERKUS W T, NORTHWOOD D O, et al. The effect of quench rate on mechanical properties of 319 aluminum alloy castings[J]. Materials Science Forum, 1996, 217-222: 783-788.