

基于机器学习的低压铸造铝合金硬度预测研究

周云玄¹ 王朦朦¹ 张志刚² 于晓丹³ 蔡东廷⁴ 王 俊⁵ 汪东红⁶ 刘 琪¹

(1. 安徽工程大学材料与工程学院, 芜湖 241000; 2. 安徽工程大学现代技术中心, 芜湖 241000; 3. 芜湖永达科技有限公司, 芜湖 241007; 4. 安徽圣尔沃智能装备有限公司, 芜湖 241060; 5. 上海交通大学材料科学与工程学院, 上海 200240; 6. 上海交通大学材料科学与工程学院凝固科学与技术研究所, 上海 200240)

摘 要 基于3 418条实际低压铸造铝合金生产数据,提出了一种结合多种机器学习算法的集成学习硬度预测模型。通过对Lasso回归、支持向量回归(SVR)、K近邻回归(KNN)、梯度提升回归(GBR)、XGBoost和Stacking模型进行比较,选取表现最佳的Stacking模型进行优化和验证。结果表明,Stacking模型在平均绝对误差(E_{MA})、决定系数 R^2 等指标上均有最优的表现。可解释的沙普加性解释(SHAP)分析表明,Cu、Zn等元素对合金硬度的影响显著。

关键词 Al-Si合金;硬度预测;机器学习;集成学习;低压铸造

中图分类号 TP331;TG249.2

文献标志码 A

DOI:10.15980/j.tzzz.T20250022

Hardness Prediction of Low-pressure Cast Aluminum Alloys Based on Machine Learning

ZHOU Yunxuan¹, WANG Mengmeng¹, ZHANG Zhigang², YU Xiaodan³, CAI Dongting⁴, WANG Jun⁵,
WANG Donghong⁶, LIU Qi¹

(1. College of Materials Science and Engineering, Anhui Polytechnic University, Wuhu 241000; 2. Modern Technology Center, Anhui Polytechnic University, Wuhu 241000; 3. Wuhu Yongda Technology Co., Ltd., Wuhu 241007; 4. Anhui Senvor Intelligent Equipment Co., Ltd., Wuhu 241060; 5. School of Materials Science and Engineering, Shanghai Jiao Tong University, Shanghai 200240; 6. Institute of Solidification Science and Technology, School of Materials Science and Engineering, Shanghai Jiao Tong University, Shanghai 200240)

Abstract: Based on 3 418 actual production data of low-pressure die-casting aluminum alloy, an ensemble learning hardness prediction model combining multiple machine learning algorithms was proposed. Lasso regression, Support Vector Regression (SVR), K-Nearest Neighbors Regression (KNN), Gradient Boosting Regression (GBR), XGBoost, and Stacking model were compared, and best-performing Stacking model was selected for optimization and validation. The results indicate that Stacking model displays excellently in terms of E_{MA} and R^2 metrics. The interpretable SHAP analysis reveals that alloy elements such as Cu and Zn can significantly impact hardness.

Key Words: Al-Si Alloy, Hardness Prediction, Machine Learning, Integrated Learning, Low-pressure Casting

铝合金以其密度低、比强度高、耐腐蚀性能好和易加工等特点,在航空航天、汽车制造和通用机械等行业中应用广泛^[1]。在工业生产中,铝合金成分复杂,这会对其力学性能产生显著影响。在众多铸造工艺中,低压铸造凭借充型过程平稳、铸件组织致密以及成品率高等优势,日益受到重视,尤其适用于高品质、薄壁铝合金铸件的制造^[2]。硬度作为衡量铸件力学性能和使用可靠性的重要指标,除受铝合金化学成分影响外,还与熔炼温度、充型速度、保温时间及后续热处理制度等

多种因素密切相关^[3]。然而,传统经验公式与简化模型在处理多维变量关系时表现不足,难以满足现代工业对硬度预测精度以及产品质量和生产效率的高要求。

近年来,随着人工智能和数据科学的迅猛发展,机器学习技术在材料设计、性能预测和材料基因工程等领域的应用逐渐兴起。通过数据驱动的建模方法,利用大量试验数据与先进算法(如随机森林、梯度提升树和支持向量机等),可以深入挖掘多维特征与目标性能之间的复杂映射关系,大幅提升预测精度并加速研发

收稿日期:2025-01-13;修订日期:2025-04-03

第一作者:周云玄,男,2000年出生,硕士研究生,E-mail: 2240211110@stu.ahpu.edu.cn

通信作者:刘琪,女,1980年出生,教授,E-mail: modieer_67@ahpu.edu.cn

引用格式:周云玄,王朦朦,张志刚,等. 基于机器学习的低压铸造铝合金硬度预测研究[J]. 特种铸造及有色合金, 2026, 46(4): 552-556.

ZHOU Y X, WANG M M, ZHANG Z G, et al. Hardness prediction of low-pressure cast aluminum alloys based on machine learning[J]. Special Casting & Nonferrous Alloys, 2026, 46(4): 552-556.

进程^[4]。这种方法不仅能够揭示材料性能与影响因素之间的潜在规律,也能为高效筛选新材料配方和工艺参数优化提供科学依据。

Al-Si 合金以其优异的铸造成形性和良好的耐腐蚀性,被广泛应用于新能源汽车零部件。然而,Al-Si 合金种类多样、合金元素复杂,各元素之间的交互作用也相当复杂。在大批量生产中,炉前分析是保证产品质量的重要环节,通常需要多次取样、进行硬度检测和质量检测,这会耗费大量人力物力。当前急需一种基于数据驱动的检验技术,借助成分与性能之间的快速预测方法,以进一步提升生产效率和产品品质,具有重要的实践意义。赵婉辰等^[5]利用 Bayesian 采样主动学习模型对 6061 铝合金的标准成分范围进行了精细优化,结合高通量试验与主动学习方法,通过构建包含复合性质特征的机器学习模型并应用 SHAP 与部分依赖图(PDP)等解释工具,深入揭示了 Mg、Si、Cu 等关键微量元素对合金硬度的定量影响,其硬度(HV)预测误差仅为 4.49 (7.23%),显著优于传统经验采样方法,充分说明了“主动学习 + 高通量试验”在优化合金成分与性能调控方面的优势。然而,该类研究往往聚焦于单一合金体系(如 6061)及其标准成分范围,尚不足以应对工业生产中多牌号、成分多样化的需求。

基于此,本研究共收集 3 418 条低压铸造铝合金试

验数据,样本均取自实际生产过程中炉前未经热处理的铸态合金,主要涵盖铸造铝合金中的 3xxx 系(Al-Si-Cu 系)和 4xxx 系(Al-Si 系),包括常见的 A360、A380、ADC12、ADC1、GDL01、AlSi12Fe、AlSi8 和 AlSi10MnMg 等合金牌号。在此基础上,综合考虑合金成分为输入变量,并结合硬度检测结果,构建并评估多种机器学习模型对铝合金硬度的预测能力^[6]。与以往仅分析特定元素或使用有限样本的研究相比,本研究基于大量试验数据,为深入探讨铝合金硬度的关键影响因素及其预测规律,引入 Stacking 算法与传统模型进行性能对比,以验证其显著优势并提高预测精度,旨在为铸造理论和工艺设计提供新的研究视角以及优化工艺参数、改进合金配方及工程实践提供参考。

1 样本数据获取

基于 3 418 条不同系列的低压铸造 Al-Si 合金试样的数据,数据包括元素质量分数、硬度等指标。所有试样均产自机边炉,其数据均直接来源于工厂的生产记录。图 1 为各铝合金牌号样本数量分布图和主要合金元素的箱线图。光谱测量的元素质量分数均在合金铸态时进行测定。合金元素成分和相应硬度测试结果见表 1,合金元素成分和硬度见表 2。

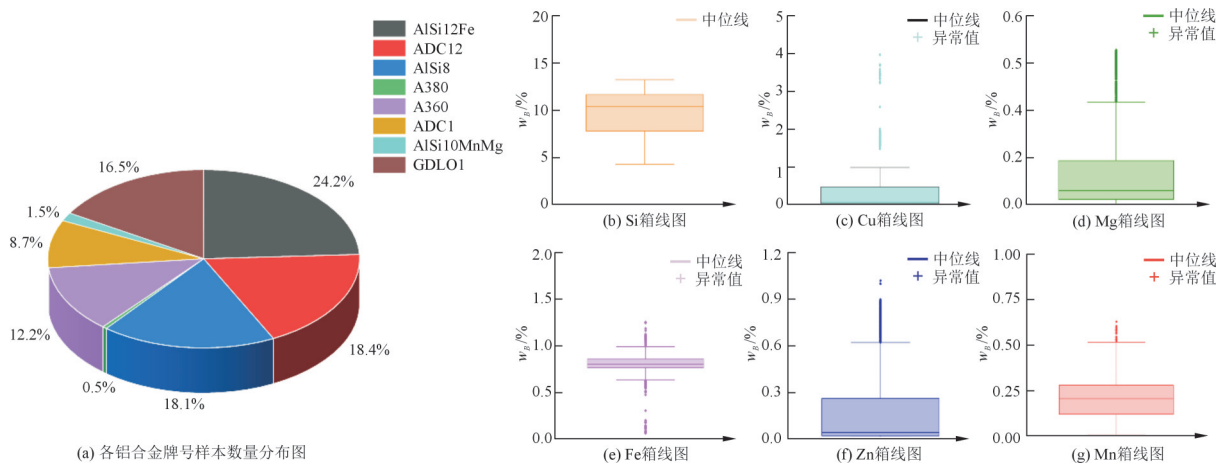


图 1 各铝合金牌号样本数量分布图和主要合金元素的箱线图

Fig.1 Sample quantity distribution of various aluminum alloy grades and box plots of main alloying elements

表 1 低压铸造铝合金数据集

序号	$w_B/\%$								硬度 (HB)
	Si	Fe	Cu	Mn	...	Pb	Sn	Al	
1	10.10	1.130	1.600	0.580	0	...	0.027	2	86.10
2	10.63	0.960	1.630	0.249	0	...	0.030	6	85.60
3	10.64	0.808	1.580	0.277	0	...	0.037	6	85.50
4	9.55	0.793	0.121	0.086	2	...	0.000	5	88.70
...	...	...	...	...	...	...	...	...	...
3 417	8.74	0.966	3.560	0.202	0	...	0.050	6	78.90
3 418	7.97	0.550	0.208	0.614	0	...	0.000	5	88.30

表 2 铝合金成分范围

含量	$w_B/\%$								硬度 (HB)
	Si	Fe	Cu	Mn	...	Pb	Sn	Al	
最小值	6.65	0.637	0.002	0.005	2	...	0.000	05	84.70
最大值	13.19	0.996	3.940	0.487	0	...	0.018	8	97.10
平均值	9.67	0.806	0.388	0.182	3	...	0.001	2	89.06

2 模型构建

2.1 数据准备

将 3 418 条合金样本数据随机划分为训练集和临时集,其中训练集占 70%(约 2 392 条),用于模型的训练;临时集占 30%(约 1 026 条),用于模型参数调优与性能评估。随后,将临时集进一步均匀划分为验证集和测试集,各占 15%(约 513 条)。其中验证集用于超参数优化及模型选择,测试集则专门用于最终评估模型的泛化能力和预测精度。这种两阶段的数据划分方法确保了验证集和测试集与训练数据严格独立,从而避免数据泄漏,客观且准确地评价模型的性能。为消除特征尺度差异对模型性能的影响,在模型训练之前,使用 Sklearn 中的 StandardScaler 对所有合金元素特征进行标准化处理。随机种子设置为 42,以便数据的复现。通过超参数网格搜索进一步优化 Stacking 模型的最佳参数,以便模型充分学习数据分布特征并提升收敛速度与预测精度。

2.2 模型训练

为预测低压铸造铝合金硬度与成分间的非线性映射关系,选取了多种机器学习算法并进行集成学习。首先,以元素质量分数为输入变量,硬度值为输出变量,分别构建了 Lasso 回归^[7]、支持向量回归(SVR)^[8]、K 近邻回归(KNN)^[9]、梯度提升回归(GBR)^[10]及 XGBoost^[11]等基学习器。Lasso 回归在最小化平方误差的同时引入 L1 正则化项:

$$\min_{\beta} \frac{1}{2m} \sum_{i=1}^m \left(y_i - \beta_0 - \sum_{j=1}^n \beta_j x_{ij} \right)^2 + \lambda \sum_{j=1}^n |\beta_j| \quad (1)$$

式中, m 为样本总数; n 为特征总数; y_i 为第 i 个样本的真实值; x_{ij} 为第 i 个样本中第 j 个特征的取值; β_0 为常数; β_j 为第 j 个特征的回归系数; λ 为正则化系数。该模型可实现特征自动选择;SVR 则通过核函数 $K(\bullet)$ 和 ϵ -不敏感损失拟合目标值。最后,通过 Stacking 集成方法^[12],将上述各基学习器的预测结果作为新特征输入到元学习器进行二次训练^[13],从而进一步融合多模型的优点并有效减小整体预测误差。

2.3 模型解释

通过绘制真实值(True values)与预测值(Predictions)的散点图,展示模型预测性能的直观对比。使用 SHAP 图通过模型解释了不同输入特征对硬度预测的贡献,提供了模型预测机制的详细解读。采用皮尔逊相关系数热图,显示了输入特征之间的线

性相关关系,通过颜色深浅和数值直观反映特征间的相似性^[14]。

2.4 模型性能评估

为了全面评估不同机器学习算法的预测性能,采用平均绝对误差(E_{MA})和决定系数(R^2)两个指标分别从误差大小和模型拟合优度两个方面衡量模型性能:

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

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^m (y_i - \hat{y}_i)^2}{\sum_{i=1}^m (y_i - \bar{y})^2} \quad (3)$$

式中, y_i 为真实值; $\hat{y}_i$ 为预测值; $\bar{y}$ 为真实值的平均值。其中, E_{MA} 值越小, R^2 越接近于 1,说明模型的预测性能越好^[15]。

3 模拟结果与讨论

3.1 模型预测结果对比

采用了 6 种机器学习算法,包括 Lasso 回归、支持向量机(SVR)、K-近邻回归(KNN)、梯度提升回归(Gradient Boosting)、XGBoost 和基于集成学习的 Stacking 模型,以及平均绝对误差(E_{MA})和决定系数(R^2)两个评价指标进行展示与分析^[16]。图 2 为 6 种模型的测试集结果。可以看出,6 种模型均接近理想拟合线($y=x$),表明这些模型在硬度值预测中具有良好的表现。线性模型(Lasso regression)由于难以捕捉复杂的非线性关系,其预测误差相对较大;非线性模型(如 SVR 和 KNN)则通过更灵活的映射显著提升了拟合能力,散点分布更集中于理想拟合线附近。XGBoost 和梯度提升回归模型表现更为优异,预测误差进一步减小, R^2 值也更大。其中,Stacking 模型通过集成多种基学习器(如 KNN、GBR 和 XGBoost),显著提升了整体预测精度, E_{MA} 最低, R^2 最高,表现出最佳的拟合能力和最小的预测误差。综合两项指标,Stacking 模型展现了其在硬度值预测任务中的显著优势。

图 3 为 6 种模型的 R^2 和 E_{MA} 对比图。可以看出,Stacking 模型在硬度值预测任务中表现最佳,其 E_{MA} 为 3.055 0,显著低于其他模型,决定系数(R^2)达到 0.840 9,说明其拟合能力和预测精度均优于其他单一模型。相比之下,线性模型(如 Lasso 和 KNN)的表现较为一般,而 XGBoost 在单一模型中表现出较高的准确性,但仍略逊于 Stacking 模型。这表明 Stacking 模型通过整合多个基学习器,显著提升了预测性能,是硬度

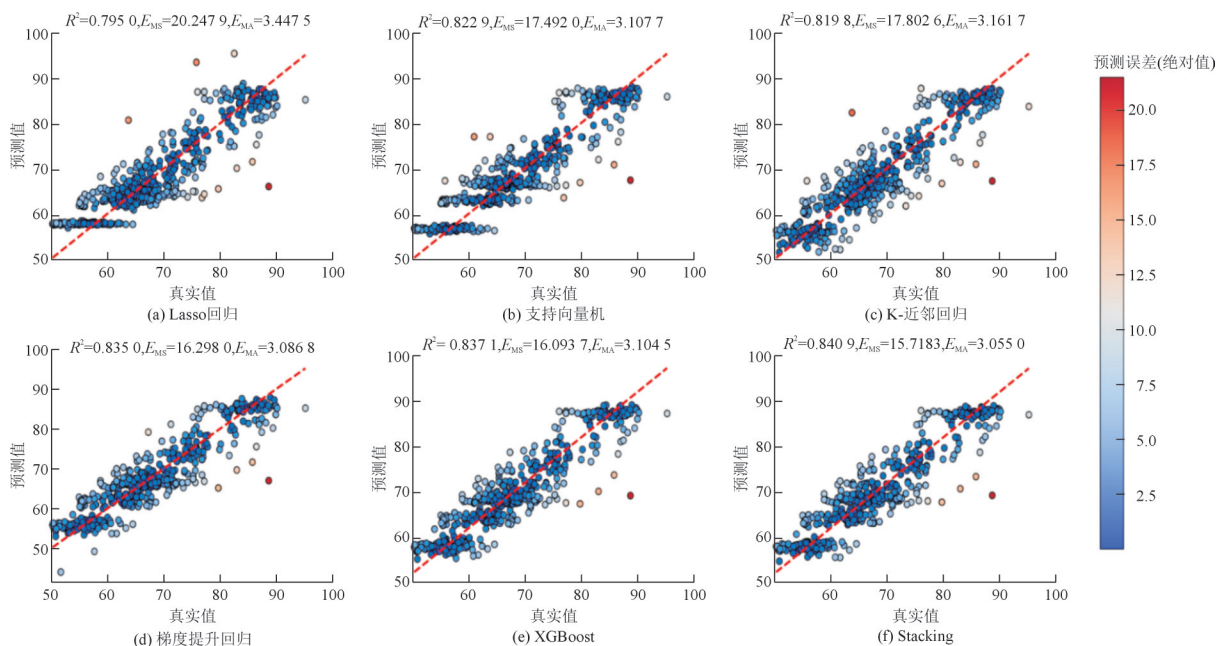


图2 6种模型测试集结果对比
Fig.2 Dataset comparison of models

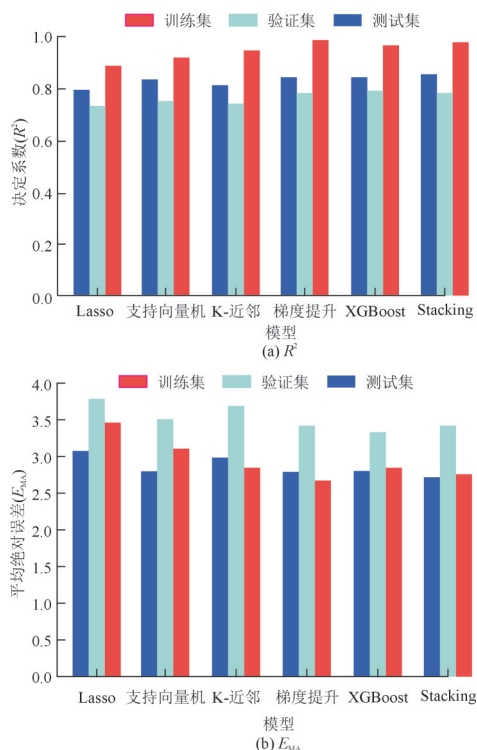


图3 6种模型的 R^2 和 E_{MA} 对比图
Fig.3 R^2 score and E_{MA} comparison of models

值预测任务的最优选择。

3.2 模型分析

选取XGBoost模型进行SHAP分析和特征相关性热图分析,主要原因在于其性能优异且解释性强^[17]。作为表现仅次于Stacking模型的基学习器,XGBoost在多项性能指标(如 R^2 和 E_{MA})上表现突出,同时其基于梯

度提升树的结构与SHAP方法高度契合,使得特征贡献的计算更加直观且高效。相比复杂的Stacking模型,XGBoost的单模型特性使其更适用于解释性分析,能清晰展现每个特征对模型预测的影响。通过对XGBoost的分析,不仅能评估模型的预测能力,还能揭示影响预测结果的关键特征及其作用方向^[18]。

图4为XGBoost模型SHAP值分布散点图和特征相关性热图。SHAP分布散点图通过点的分布及颜色直观反映了各特征对铝合金硬度预测的贡献。SHAP值越大,特征对预测结果的影响越显著。从图4a可以观察到,Cu的SHAP值分布范围最广,说明Cu是影响本样本集硬度预测结果的关键因素。其中,Cu的SHAP值整体偏正,且在高特征值(红色)区域贡献更为显著,表明Cu含量的增加会显著提升预测的硬度值。其次,Zn、Si和Mg对预测硬度也有一定影响,但作用不如Cu明显。相对而言,Fe和Cr的SHAP值接近0,对硬度预测影响最小,表明其在模型中的重要性较低。从图4b可以看出,Cu含量与硬度之间呈正相关,表明在样本中,Cu含量的增加通常伴随着硬度的提升。Cu、Mg、Si和Zn是铝合金中常见的固溶强化元素。在本试验样本集中,所有试样均取自炉前分析的铸锭,尚未经过时效处理,因此大多数合金元素主要以固溶状态存在于基体中。值得注意的是,Cu与Al之间存在一定的原子半径差,且Cu在Al中具有较高的固溶度,这使其具有更好的固溶强化效果。该结果进一步验证了特征相关性热图在揭示元素与硬度之间关系方面的可靠性。

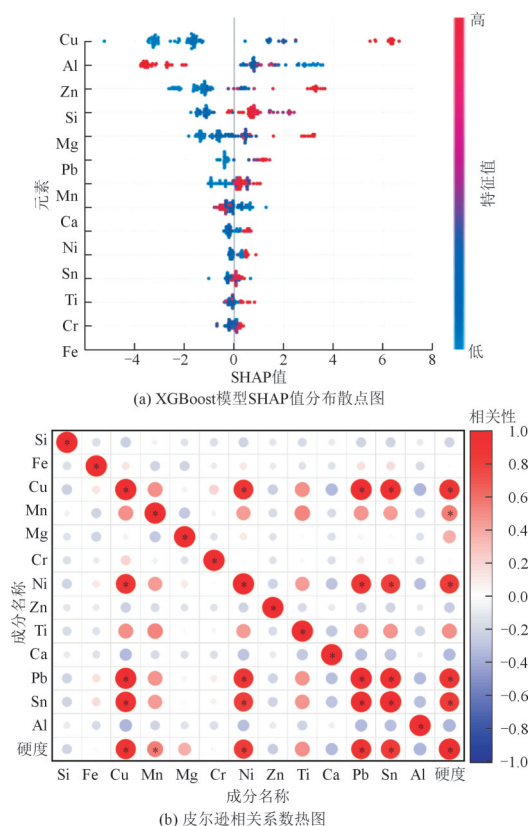


图4 XGBoost模型SHAP值分布散点图和特征相关性热图
Fig.4 Scatter plot of SHAP value distribution and feature correlation heatmap for XGBoost model

4 结 论

(1)采用了实际生产中3 418个低压铸造铝合金试样元素作为输入特征,硬度值作为目标变量,构建了多种机器学习模型,结果显示Stacking模型的综合性能最佳,其 R^2 达到0.840 9,显著优于单一模型;同时,其 E_{MA} 最低,表明其在捕捉数据特征的非线性关系和提升预测精度方面具有显著优势。

(2)在基于XGBoost的SHAP分析中,Cu对硬度值的预测贡献最为显著,凸显其在预测结果中的主导地位。特征重要性分析同样验证了Cu在硬度预测中的关键作用,两种方法的结论高度一致,进一步体现了模型的可靠性。从SHAP值重要性排序来看,Cu>Al>Zn>Si>Mg>Pb>Mn>Ca>Ni>Sn>Ti>Cr>Fe;相关系数热图也表明Cu与硬度值呈现显著相关性。综合分析表明,这些元素的组合及相互作用对硬度具有重要影响,为合金的设计与优化提供了可靠的数据支撑。

参 考 文 献

[1] 钟坪和. 铝合金汽车覆盖件材料特性的应用评价方法[J]. 汽车实用技术, 2024, 49(2): 130-133.

- [2] 张东生. A356低压铸造铝合金车轮工艺优化及组织性能研究[D]. 河北秦皇岛:燕山大学, 2023.
- [3] 范航航, 刘飞, 郑亦玮, 等. Li/Sc复合添加对铸态Al-Cu-Mg铝合金微观组织和硬度的影响规律[J]. 材料导报, 2024, 38(24): 228-234.
- [4] 汪星辰, 袁灵洋, 王鑫, 等. 基于机器学习的免热处理压铸铝合金力学性能预测[J]. 特种铸造及有色合金, 2024, 44(11): 1 498-1 503.
- [5] 赵婉辰, 郑晨, 肖斌, 等. 基于Bayesian采样主动机器学习模型的6061铝合金成分精细优化[J]. 金属学报, 2021, 57(6): 797-810.
- [6] 郝永志, 赵海东, 林嘉华. 基于机器学习的挤压铸造铝合金力学性能预测[J]. 特种铸造及有色合金, 2019, 39(8): 859-862.
- [7] 陈再续, 田宏杰, 刘亚举, 等. 基于Lasso-Bayesian改进的Kriging代理模型优化方法及其应用[J]. 煤矿机械, 2024, 45(12): 194-199.
- [8] 唐菲菲, 胡佳赢, 马英, 等. 基于递归特征消除选择的粒子群优化-支持向量机回归模型的滑坡位移预测方法[J]. 工业建筑, 2024, 54(11): 50-60.
- [9] 孙广明, 贾新羽, 陈良亮. 基于K近邻回归的锂离子电池健康状态估计[J]. 电源技术, 2022, 46(8): 872-875.
- [10] 张宏鸣, 刘雯, 韩文霆, 等. 基于梯度提升树算法的夏玉米叶面积指数反演[J]. 农业机械学报, 2019, 50(5): 251-259.
- [11] 梅金娜, 王鹏, 韩姚磊, 等. 基于TPE-XGBoost算法的镍基600合金应力腐蚀裂纹扩展速率预测模型[J]. 稀有金属材料与工程, 2021, 50(7): 2 399-2 408.
- [12] 徐慧丽. Stacking算法的研究及改进[D]. 广州: 华南理工大学, 2018.
- [13] 关慧, 许航, 蔡丽娥. 基于词性和改进Stacking模型的需求依赖关系提取[J]. 计算机工程与设计, 2024, 45(11): 3 345-3 351.
- [14] 谢超林, 唐昌平, 刘筱, 等. 基于机器学习的AZ31镁合金轧制板材腐蚀电位预测研究[J]. 精密成形工程, 2024, 16(11): 75-81.
- [15] 王芝秀, 李海, 顾建华, 等. Cu含量对Al-Mg-Si-Cu合金微观组织和性能的影响[J]. 中国有色金属学报, 2012, 22(12): 3 348-3 355.
- [16] JUAN Y F, NIU G S, YANG Y, et al. Accelerated design of Al-Zn-Mg-Cu alloys via machine learning[J]. Transactions of Nonferrous Metals Society of China, 2024, 34(5): 709-723.
- [17] CHEN X, ZHONG J, LIN H, et al. High precision modeling with stacked neural network to predict the mechanical property of aluminum alloy[J]. Materials Letters, 2024, 375: 137 187.
- [18] HU M, TAN Q, KNIBBE R, et al. Designing unique and high-performance Al alloys via machine learning: Mitigating data bias through active learning[J]. Computational Materials Science, 2024, 244: 113 204.

(编辑: 刘晨辉)

欢迎登陆期刊官网

投稿、查稿、审稿

欢迎登陆《特种铸造及有色合金》杂志官方网站投稿、阅读、审稿, 期刊论文彩色版本均可在网站免费在线阅读或下载pdf文件, 并可体验AI导读功能, 网址: www.special-cast.com, 欢迎访问!