DOI:10.16410/j.issn1000-8365.2026.6049

高熵合金力学性能预测的异质因果效应研究

邓菁玉[1],虎小兵[1],王　文[1,2],王快社[1]

(1. 西安建筑科技大学 冶金工程学院 功能材料加工国家地方联合工程研究中心,陕西 西安 710055;2. 新材料陕西实验室,陕西 西安 710018)

摘　要:利用机器学习揭示高熵合金力学性能预测的定量因果效应,旨在解决成分、工艺优化中单一参数独立贡献难以被关联模型剥离量化的难题,其核心挑战不仅在于关键因素的准确识别,更在于量化该效应随其他因素变化的异质性。本研究提出一种结合物理特征工程、机器学习建模、可解释相关性分析与因果推断的因果效应定量分析框架,实现了对高熵合金力学性能的准确预测及其异质因果效应的定量表征。通过构造物理描述符,显著提升了高熵合金力学性能的预测精度,并识别出影响预测的关键因素为轧制变形量(CR)和退火温度(AT),最终获得其与力学性能之间的定量因果效应。CR 每增加 10%,抗拉强度变化范围为 -13.0~92.0 MPa(平均变化 50.1 MPa),伸长率变化范围为 -5.02%~0.62%(平均变化 -0.29%);AT 每升高 100 K,抗拉强度变化范围为 -164.9~-57.2 MPa(平均变化 -1 10.6 MPa),伸长率变化范围为 5.2%~11.2%(平均变化 8.3%)。宽的效应范围是由除关键因素外的其他弱相关因素组合的异质性决定,该效应的可靠性通过其他实验观测值验证。

关键词:高熵合金;性能预测;异质因果效应;SHAP 分析;因果推断

中图分类号:TG156.2　　**文献标识码**:A　　**文章编号**:1000-8365(2026)06-0640-12

Study on the Heterogeneous Causality Effect in the Prediction of the Mechanical Properties of High-entropy Alloy

DENG Jingyu[1], HU Xiaobing[1], WANG Wen[1,2], WANG Kuaishe[1]

(1. School of Metallurgical Engineering, National and Local Joint Engineering Research Center for Functional Materials Processing, Xi'an University of Architecture and Technology, Xi'an 710055, China; 2. Shaanxi Laboratory of Advanced Materials, Xi'an 710018, China)

Abstract: To predict the mechanical properties of high-entropy alloys by machine learning, this study aimed to solve the quantitative challenge that the independent contribution of a single parameter to process control is difficult to isolate from correlated models. The core challenge of identifying quantitative causal effects lies not only in accurately identifying key factors but also in quantifying the heterogeneity of these effects as they vary with respect to other factors. A quantitative causal effect analysis framework that integrates physics-based feature engineering, machine learning modelling, interpretable correlation analysis, and causal inference was proposed in this study, enabling accurate prediction of the mechanical properties of high-entropy alloys and quantitative characterization of heterogeneous causal effects. By constructing physical descriptors, the prediction accuracy is significantly enhanced, and the key factors influencing the predictions are identified as the cold rolling reduction (CR) and the annealing temperature (AT). Ultimately, the quantitative causal effects of the two factors on the mechanical properties are obtained: for a 10% increase in the CR, the ultimate tensile strength varies between -13.0 and 92.0 MPa (with an average change of 50.1 MPa), and the elongation varies between -5.02% and 0.62% (with an average change of -0.29%); for a 100 K increase in AT, the ultimate tensile strength varies between -164.9 and -57.2 MPa (with an average change of -1 10.6 MPa), and the elongation varies between 5.2% and 11.2%　(with an average change of

收稿日期:2026-03-28

基金项目:国家自然科学基金(U25A20284, 52222410);杰出青年科学基金(2022JC-24);新材料陕西实验室开放课题(2024ZY-JCYJ-04-09)

作者简介:邓菁玉,1995 年生,博士生.研究方向为机器学习辅助新材料设计和研发.Email:dengjingyu@xauat.edu.cn

通信作者:虎小兵,1995 年生,博士,讲师.研究方向为人工智能赋能高性能金属材料.Email:xbhu@xauat.edu.cn

王　文,1985 年生,博士,教授.研究方向为高性能金属材料制备.Email:wangwen2025@126.com

引用格式:邓菁玉,虎小兵,王文,王快社.高熵合金力学性能预测的异质因果效应研究[J].铸造技术,2026,47(6):640-651.

DENG J Y, HU X B, WANG W, WANG K S. Study on the heterogeneous causality effect in the prediction of the mechanical properties of high-entropy alloy[J]. Foundry Technology, 2026, 47(6): 640-651.

中国知网　https://www.cnki.net

8.3%). The wide range of effects is determined by the heterogeneity arising from the combinations of other weakly correlated factors beyond the key factors, and the reliability of these effects is validated through other experimental observations.

Key words: high-entropy alloys; property prediction; heterogeneous causal effect; SHAP analysis; causal inference

高熵合金(high-entropy alloys, HEAs)因其优异的抗疲劳性能、抗腐蚀性能,以及良好的强度–塑性匹配,在航空发动机、核反应堆等极端环境服役的国防装备中展现出显著的应用潜力[1-2]。HEAs 通常含有 5 种及以上的主要元素,每种元素的原子百分比介于 5%~35%之间[3],这种独特的多主元混合特征不仅带来了近乎无限的成分空间,也赋予其高度复杂的微观结构与性能可调性[4-5]。针对不同的成分设计方案,轧制与热处理等加工工艺也需相应调整,才能实现微观组织和力学性能的精准调控[6-8]。由此可见,影响 HEAs 力学性能的因素错综复杂,揭示其内在关联面临较大挑战。

近年来,机器学习凭借强大的非线性拟合能力,可有效挖掘材料特征与目标性能之间的潜在关联,已在材料设计与性能预测方面展现出广阔的应用前景[9-12]。与相图计算法(computer coupling of phase diagrams and thermochemistry, CALPHAD)等物理模型方法相比,机器学习不仅具备更高的预测效率与准确性,还表现出良好的模型选择灵活性,能够适应更广泛的材料体系和问题场景[13]。Khakurel 等[14]使用 96 条耐火 HEAs 数据样本构建梯度增强模型,预测杨氏模量,模型预测的决定系数高达 0.90。Bhandari 等[15]使用随机森林建立了高精度的 HEAs 高温屈服强度预测模型,并利用实验验证了模型的预测可靠性。诸如此类的案例不胜枚举[16-17]。然而,这种“黑箱式”机器学习虽能准确关联影响因素与目标性能,但其预测结果无法理解。为解决这一问题,越来越多的研究使用沙普利加法解释法(Shapley additive explanations, SHAP)来解析机器学习模型的决策逻辑[18]。例如,Mahmoud 等[19]使用人工神经网络(artificial neural network, ANN)建立了成分–硬度之间的预测模型,决定系数达 0.89,通过使用 SHAP 识别出对硬度预测影响最大的关键成分因素,并量化了每个因素对最终预测的贡献程度。尽管该方法可帮助研究者理解模型的决策过程,但这仅反映了输入变量与目标性能的平均相关性,并不涉及其间的定量因果机制。更重要的是,在 HEAs 复杂的成分–工艺空间中,变量间可能存在多重共线性特征,导致相关性分析产生误导性判断[17]。因此,如何量化关键影响因素与力学性能间的定量因果效应还需深入探索。

双重机器学习(double machine learning, DML)[20]是一种将机器学习与传统计量经济学相结合的因果推断方法,可在高维数据和非线性关系下,无偏估计影响因素对预测目标的因果效应,为克服上述挑战提供了可行思路。例如,Ly 等[21]采用 DML 估算了物理特征变化对 HEAs 硬度的影响,发现价电子浓度、混合焓和原子尺寸差每增加 1 个单位,硬度分别平均降低 184.29、3.38 和 6.4 HV。这种平均因果效应在特定成分体系下可靠性较高,即假设模型所得因果关联在不同样本间具有同质性。然而,在 HEAs 复杂的成分–工艺–组织–性能关系背景下,关键因素对力学性能的影响效应必然随其他因素变化而呈现异质性,仅凭平均化处理难以揭示其真实作用机制。

因果随机森林通过直接构建对个体处理效应的自适应局部估计,能够灵活、稳健地提取异质因果效应[22],但该方法在材料领域还未见报道。据此,本文将双重机器学习与因果随机森林相结合,提出一种综合物理特征工程、机器学习建模、可解释相关性分析与因果推断的因果效应定量分析框架,系统探究影响高熵合金力学性能的关键因素及其异质因果效应。

1　实验材料与方法

因果效应定量分析(quantitative causal analysis, QCA)框架如图 1 所示,具体包括数据获取、特征工程、机器学习建模、模型可解释性分析及因果推断等模块。该框架的工作流程为:

(1)数据获取　从文献中收集高熵合金成分、工艺参数及力学性能数据。

(2)特征工程　构造基于元素本征性质的物理描述符,并采用递归特征消除筛选重要特征。

(3)机器学习建模　结合物理描述符,训练多个模型,优选最佳模型实现力学性能的高精度预测。

(4)模型可解释性分析　利用 SHAP 方法识别关键因素及其对力学性能的非线性影响趋势。

(5)因果推断　结合双重机器学习和因果随机森林,量化关键因素对力学性能的异质性因果效应,并通过其他实验数据验证该效应的可靠性。

1.1　数据来源与物理特征工程

研究所用数据来源于已公开发表的 HEAs 实验研究文献[23],共收集 501 条数据,其中包含 10 个合金成分参数、4 个工艺参数等特征变量及 2 个力

中国知网　https://www.cnki.net

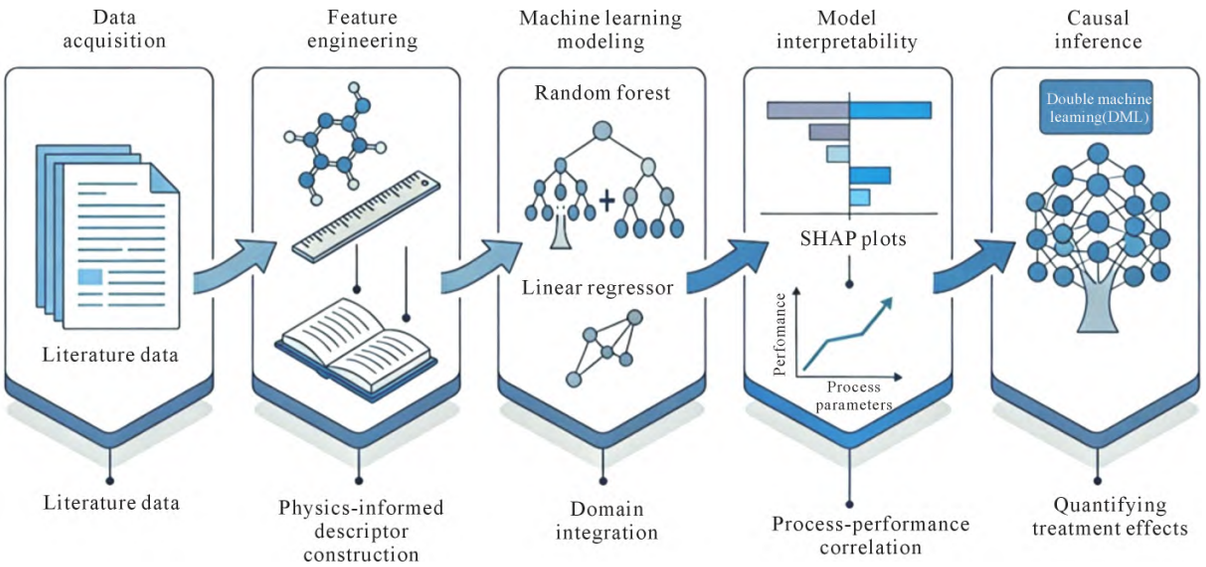

图 1 因果效应定量分析框架示意图

Fig.1 Schematic diagram of the quantitative causal effect analysis framework

学性能指标。数据集以 CoCrFeMnNi 基 FCC 高熵合金为主要研究对象，同时包含添加 Al、V、Mo、Cu 等元素的改性合金体系，覆盖 FCC 单相与 FCC+BCC 双相结构类型，成分上同时包含等原子比与非等原子比设计，均为常规 3d 过渡族金属系高熵合金，不涉及轻金属高熵合金与难熔高熵合金体系；工艺上以冷轧与退火相结合的热机械加工态为主，同时包含均匀化处理与铸态等典型工艺样本。成分涵盖 Cr、Mn、Fe、Co、Ni、Cu、Al、V、Mo 等常见主元素，工艺参数包括均匀化温度(HT)、冷轧变形量(CR)、退火温度(AT)及退火时间(At)，力学性能指标为极限抗拉强度(UTS)和伸长率(EL)。

采用皮尔逊相关系数(r)初步判断成分、工艺与性能之间的线性关联强度，如式(1)所示。r 的取值范围为[-1, 1]，其绝对值越接近 1，表明两变量间的线性相关性越强；r>0 表示正相关，r<0 表示负相关。

$$r=\frac{\Sigma_{i=1}^{n}(X_i-\bar{X})(Y_i-\bar{Y})}{\sqrt{\Sigma_{i=1}^{n}(X_i-\bar{X})^2}\sqrt{\Sigma_{i=1}^{n}(Y_i-\bar{Y})^2}} \tag{1}$$

式中，X_i、Y_i 分别为特征变量 X 和 Y 第 i 个样本值；n 为样本总数；$\bar{X}$、$\bar{Y}$ 分别为特征变量 X 和 Y 的样本均值。

为在机器学习模型中嵌入 HEAs 的物理冶金机制，本研究通过元素价电子数、电负性等本征性质构建物理描述符，依据式(2)，利用元素性质的加权平均计算得到合金的基本性质 Δ，如平均剪切模量、平均原子半径等；依据式(3)，表征不同元素原子特性引起的合金晶格畸变、错配等特征。

$$\Delta P=\sum_{i}^{n} c_i\cdot P_i \tag{2}$$

$$\delta P=\sqrt{\sum_{i}^{n} c_i\cdot\left(1-\frac{P_i}{\Delta P}\right)^2} \tag{3}$$

式中，c_i 为第 i 个元素的原子百分比；n 为元素个数；P_i 为元素属性。

新构造特征总数为 56 个，为避免特征本身潜在的多重共线性问题和维度过高带来的模型过拟合问题，采用递归特征消除法进行特征筛选。这是一种基于模型权重的贪心搜索算法，其核心思想是通过反复训练模型并剔除最不重要的特征，逐步逼近最优特征子集。本研究采用 5 折交叉验证评估每轮特征子集为输入时模型的预测精度。

1.2 机器学习模型评价与选择

为建立高精度预测模型，采用基于树模型的随机森林 RF、梯度提升树 XGBoost、梯度提升决策树 GBDT，基于距离的 K 近邻 KNN，基于线性关系的岭回归 Ridge、线性回归 Linear 以及支持向量回归 SVR 等 7 种不同类型的机器学习模型。采用决定系数(R^2)评估模型性能，通过下式计算获得：

$$R^2=1-\frac{\Sigma_i(y_i-\hat{y}_i)^2}{\Sigma_i(y_i-\bar{y})^2} \tag{4}$$

式中，y_i 是第 i 个样本的真实值；$\hat{y}_i$ 是第 i 个样本的预测值；$\bar{y}$ 为真实值的平均值。建模前，采用 Z-Score 标准化对所有特征进行归一化处理。按照 4:1 的比例将数据集随机划分为训练集和测试集，并通过自助重采样交叉验证法重复抽样 200 次，估计模型预测精度。

1.3 可解释性分析

采用 SHAP 分析方法解释模型预测结果。该方法的本质是估算预测函数的条件期望，即已知特征

中国知网 https://www.cnki.net

取值时的预期性能提升。通过下式计算：

$$\phi_j=\sum_{S\subseteq F\setminus\{j\}}\frac{|S|(|F|-|S|-1)}{|F|}[f_{S\cup\{j\}}(x)-f_S(x)] \tag{5}$$

式中，ϕ_j 为特征 j 的 SHAP 值；F 为所有特征集合；S 为特征子集；$f_S(x)$为仅用子集 S 的预测值。

通过全局贡献度分析来量化各成分及工艺参数对力学性能预测的贡献程度，进而筛选出最关键的影响因素。该分析通过计算特征绝对 SHAP 均值获得：

$$I_j=\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\left|\phi_j^{(i)}\right| \tag{6}$$

式中，I_j 表示特征对性能预测的贡献度，越大表示特征 j 对性能影响越显著；n 为样本数。

1.4　异质因果效应估计

采用 DML 法，并结合因果随机森林估计异质因果效应。DML 在控制高维协变量的前提下分离处理变量(T)对结果变量(Y)的因果效应。首先构造正交化函数，以 SHAP 分析筛选出关键特征作为处理变量，UTS 和 EL 作为结果变量，其余成分与工艺特征作为弱相关的协变量。使用 1.2 节方法筛选出高精度模型分别拟合 Y 和 T 随 X 变化的函数方程，并获得相应估计值和，通过下式计算获得：

$$\hat{Y}=\hat{g}(X)\quad \hat{T}=\hat{m}(X) \tag{7}$$

计算残差$\tilde{Y}$和$\tilde{T}$：

$$\tilde{Y}=Y-\hat{Y}\quad \tilde{T}=T-\hat{T} \tag{8}$$

随后，使用因果随机森林进行残差回归拟合，估计每个样本的个体处理效应$\hat{\theta}(X)$：

$$\tilde{Y}=\theta(X)\tilde{T}+\epsilon \tag{9}$$

式中，ϵ 为随机误差项，代表因果随机森林在拟合残差的局部线性关系时，模型无法解释的剩余波动。因果随机森林通过对特征空间递归划分，估计局部线性处理效应，从而获得异质性因果效应随样本变化的分布情况。通过以上双重机器学习方法，本文估计处理变量的平均因果效应 $\bar{\theta}$ 与个体处理效应 θ。

2　实验结果及讨论

2.1　成分/工艺–性能数据相关性分析

通过皮尔逊相关性热图与显著性标记，系统分析数据集中成分–工艺–性能之间的线性关联强度，结果如图 2 所示。图中通过颜色映射相关系数，红色表示正相关，蓝色表示负相关。下三角区域标注了相关系数的统计显著性水平，无星号表示 $p>0.05$，代表数据统计无显著性；* 表示 $0.01<p\leqslant0.05$，** 表示 $0.001<p\leqslant0.01$，*** 表示 $p\leqslant0.001$。p 值越小，该相关性结果偏离随机变化的可能性越低，具有一定的统计代表性和可重复性。由此可见，矩阵中的相关性分析大部分具有统计显著性。

从合金成分与力学性能的线性关联来看，Co、Cr 与 UTS 均呈显著正相关，Mn 与 EL 呈显著负相关，这些显著性相关表明元素对力学性能具有直接

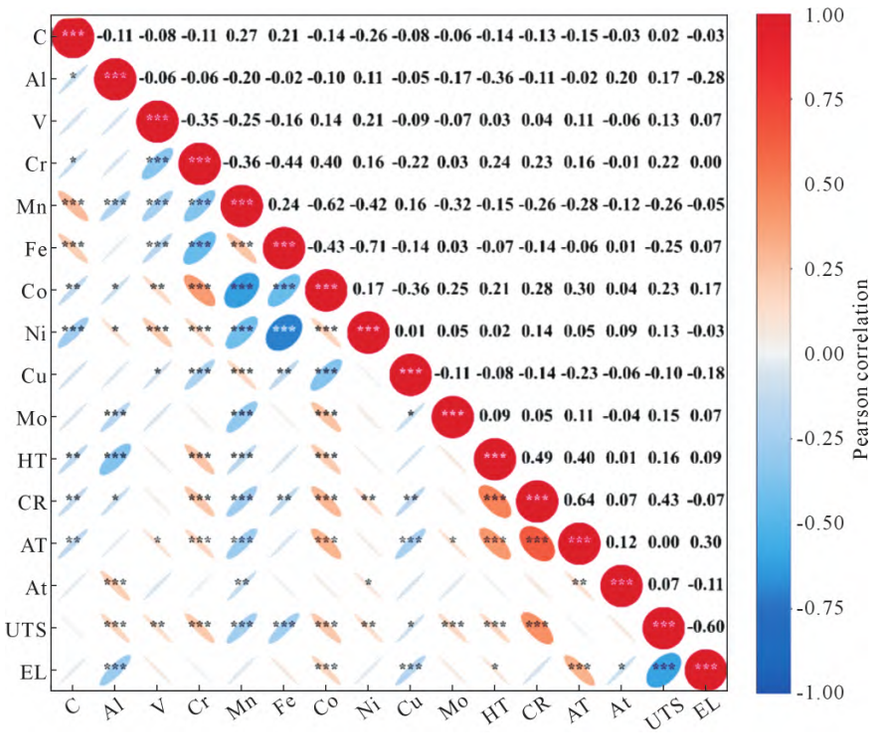

图 2　初始数据集相关性分析

Fig.2　Correlation analysis on the initial dataset

中国知网　https://www.cnki.net

影响,但相关系数绝对值普遍较低(多数<0.3),反映出单一元素对力学性能的线性贡献有限，这是由HEAs中多元素协同作用产生性能非线性叠加的鸡尾酒效应引起的,即力学性能并非由单个元素独立决定,而是多元素协同作用的复合结果。Fe元素与Ni元素之间 r=–0.71,表明其强的负相关性,可能由于FCC型高熵合金中Fe与Ni的晶格竞争占位与短程有序效应,二者原子尺寸失配、磁相互作用及混合焓差异,导致在FCC固溶体中形成负相关替代型的原子分布模式。Wang等[24]在CoCuFeNiPd高熵合金使用蒙特卡洛与密度泛函理论联合模拟合金热力学性质,发现FCC晶格中Fe与Ni存在强烈的亚晶格占位竞争,且二者原子尺寸差异与混合焓特性导致其无法同时在晶格中大量共存。随着Fe含量的升高,Ni元素的固溶度显著降低，形成典型的替代型负相关分布。此外,Cr-Mn之间的 r=–0.36,可能是因为Cr对FCC相存在稳定作用,Mn对FCC相存在去稳定作用,导致两个元素之间呈现负相关特性。Ma等[25]对CoCrFeMnNi高熵合金相稳定性的系统研究表明:Cr元素倾向于稳定FCC固溶相,有助于抑制BCC与σ相析出；而Mn元素则会降低FCC相的热力学稳定性,促进低温下的相分解。二者在相稳定贡献、晶格偏聚行为上表现出显著的对立效应。此外,HEAs的成分设计受各主元原子百分比之和为1条件约束,这导致成分变量之间天然存在多重共线性关系,任一元素含量的减少必然伴随其他元素含量的增加,这也是皮尔逊相关性分析常能发现不同元素间强相关的原因所在[17]。

图2还发现工艺参数与力学性能呈现显著相关性。HEAs中原子扩散速率低,再结晶和沉淀析出过程对HT、AT、At更为敏感。冷轧处理引入大量位错和畸变,导致加工硬化,强度提升,塑性降低,但数据中CR与UTS呈微弱的负相关,这可能是因为冷轧后材料经历了退火导致软化。AT的提高有助于析出相均匀弥散分布,改善塑性,但强度变化不显著，说明HEAs体系中的缓慢扩散效应使得材料对AT更加敏感[26]。At和强度与塑性的 r 值分别为0.07和-0.11,表明在该数据集上,At与强度和塑性均无显著线性相关性。上述分析表明,HEAs成分–工艺–性能关系复杂，还需进一步引入机器学习模型建立定量模型,以实现力学性能的准确预测。

2.2 物理描述符增强模型预测能力分析

为预测HEAs的UTS和EL,使用RF、XGBoost、GBDT、KNN、Ridge、Linear、SVR等7种典型机器学习算法,分别建立预测模型,并利用 R^2 评估模型性能。从图3a可以看出,对于UTS,XGBoost与RF表现最优,200次交叉验证后，所有子模型 R^2 的中位数分别为0.78和0.76,但XGBoost的 R^2 值较为集中,RF部分子模型 R^2 值小于0.7,表明其对训练数据变化的敏感性较强。相比之下,KNN、SVR和Linear表现较差,R^2 的中位数分别为0.51、0.52和0.48,反映了这些模型难以捕捉HEAs成分–工艺–性能之间的复杂非线性关系。从图3b可以看出,对于EL,RF、XGBoost和GBDT模型表现最佳,R^2 中位数分别为0.68、0.67和0.65,Ridge的 R^2 中位数降至0.52,Linear仅为0.46。整体而言,XGBoost表现最优,因此选择该模型执行预测任务。图3c和d展示了XGBoost模型在每个样本上的交叉验证预测结果。可以看出,数据点分布在对角线两侧,预测偏差较大,表明模型难以完全捕获多因素协同作用，无法用于HEAs的强度和塑性预测。

为提高模型预测精度,使用式(2)和(3)构造新特征。通过加权平均与加权方差数学计算，将原子半径、电负性、价电子数等本征元素属性(表1),与数据集中合金成分结合,系统构建了56个具有明确物理意义的新描述符，从而将影响合金微观结构与性能的关键物理机制(如晶格畸变、化学键合倾向、电子交互作用等)显式地编码为模型可处理的特征变量。

表1 本征元素属性符号表
Tab.1 Intrinsic element properties and their symbols

Element property	Feature symbol	Element property	Feature symbol
Melting point	mp	Heat of formation	ΔfHΘm
Boiling point	B.p	Electron affinity	X
Density	ρ	Van der Waals radius	Rv
First ionization energy	I1	Bulk modulus	K
Specific heat capacity	c	Coefficient of thermal expansion	α
Atomic mass	m	Young‘s modulus	E
Molar volume	Vm	Work function	Φ
Enthalpy of fusion	ΔH	Covalent radius	Rc
Enthalpy of vaporization	ΔHV	Poisson's ratio	ν
Enthalpy of atomization	DelHat	Binding energy	BE
Thermal conductivity	λ	Atomic radius	Ar
Electronegativity (Allen)	Xa	Electronegativity (Pauling)	Xp
Second ionization energy	I2	Valence electron concentration	VEC
Shear modulus	G	Atomic volume	Av

构建新特征后,数据集的特征维度从14增加至70,众多特征间因多重共线性,存在信息冗余、模型过拟合的风险,因此需要进行降维处理。采用递归消

中国知网 https://www.cnki.net

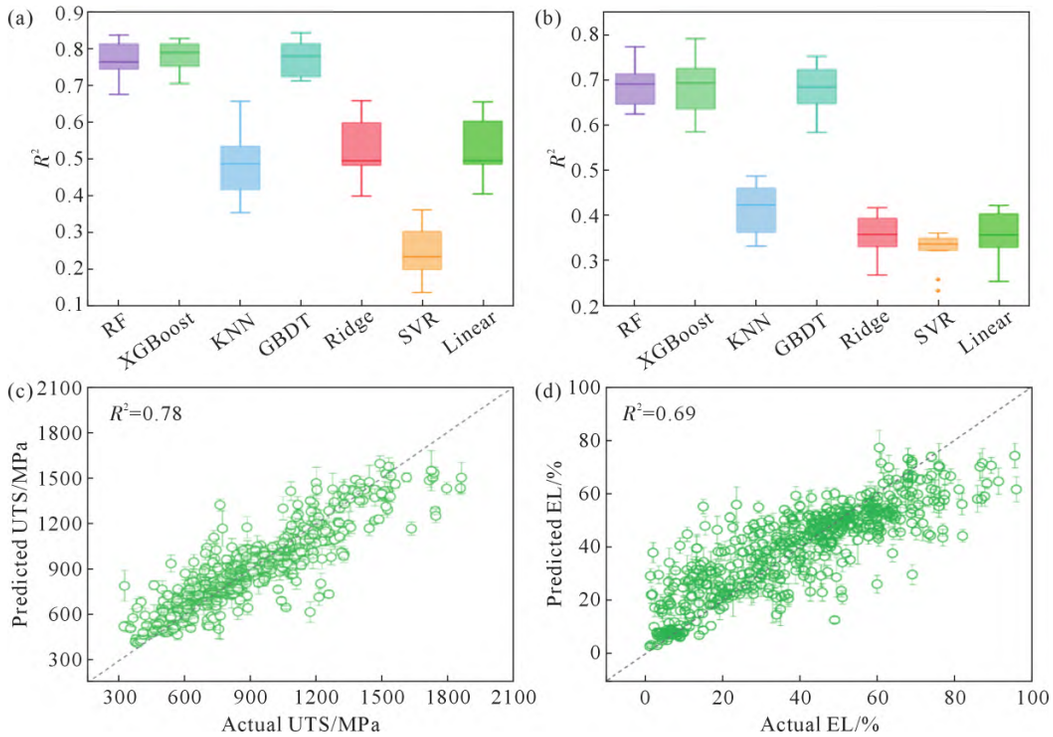

图 3　机器学习预测模型性能评估:(a) 所有模型对 UTS 的预测性能对比;(b) 所有模型对 EL 的预测性能对比;(c) XGBoost 模型的 UTS 真实值和预测值对比;(d) XGBoost 模型的 EL 真实值和预测值对比

Fig.3　Performance evaluation of the machine learning prediction models: (a) comparison of UTS prediction performance across all the models; (b) comparison of EL prediction performance across all the models; (c) comparison between actual and predicted UTS values using the XGBoost model; (d) comparison between actual and predicted EL values using the XGBoost model

除法进行降维,迭代过程模型性能变化如图 4a 和 b 所示。对于 UTS 与 EL 的预测模型,随着移除特征数量的逐步增加,模型预测精度先稳定不变,后快速下降,精度转折点对应最佳特征移除数。由此确定 UTS 预测的最佳特征子集为:AT、CR、δE、Δg、At、δAr、δVm、Δρ、δVEC;在 EL 预测的最佳特征子集为:

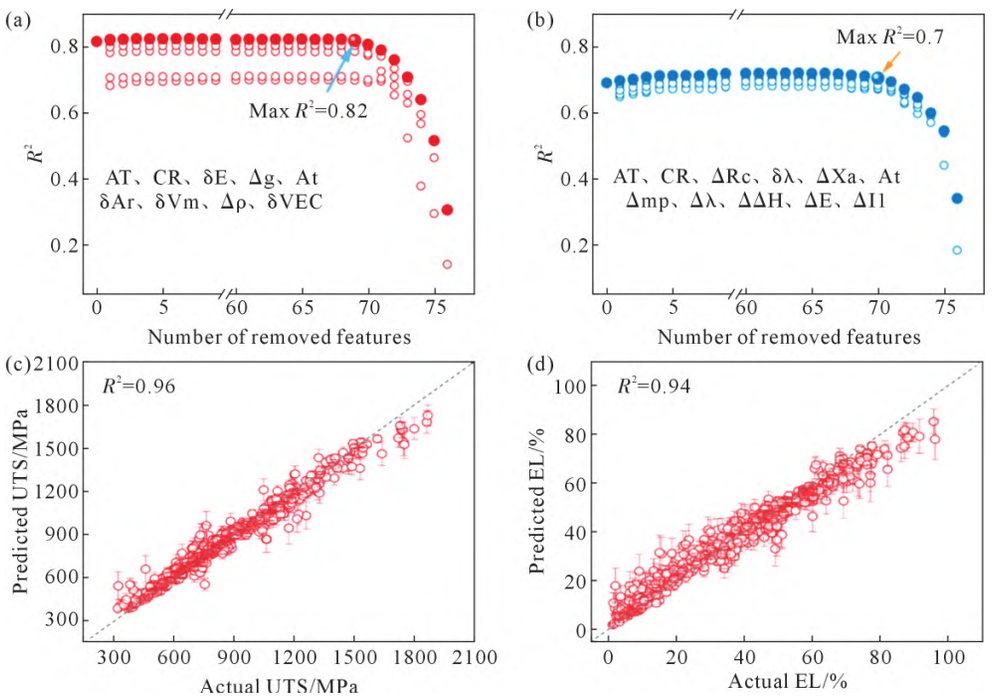

图 4　物理描述符选择及 XGBoost 模型性能评估:(a) 影响 UTS 的物理描述符选择;(b) 影响 EL 的物理描述符选择;(c) UTS 预测模型性能评估;(d) EL 预测模型性能评估

Fig.4　Selection of physical descriptors and evaluation of XGBoost model performance: (a) selection of physical descriptors for influencing UTS; (b) selection of physical descriptors for influencing EL; (c) performance evaluation of the UTS prediction model; (d) performance evaluation of the EL prediction model

中国知网　https://www.cnki.net

AT、CR、ΔRc、δλ、δXa、At、Δmp、Δλ、ΔΔH、ΔE、ΔI1。将筛选出的最佳特征子集作为输入，重新训练 XGBoost 模型，预测结果如图 4c 和 d 所示。相比特征构造前的模型，UTS 预测的 R^2 值从 0.78 上升至 0.96，EL 预测的 R^2 值从 0.69 上升至 0.94。

为了深入分析模型预测精度的提升效果，采用 K-means 聚类算法，将数据集中的样本划分为 3 个性能区间：EL 较高、UTS 中等的高塑性区；UTS 较高、EL 中等的高强度区；以及强塑平衡区。在此基础上，分别绘制旧模型(特征构造前)与新模型(特征构造后)在各组内的预测值与真实值散点图及残差分布。在高强度区(图 5a)，旧模型在部分样本上的预测出现较大偏差，特别是在超高强度附近表现出明显的低估，残差分布较宽，约 -250~500 MPa。相比之下，新模型在该区间的精度提升最为明显(图 5c)，残差分布缩小至 -150~300 MPa，这可能由于加权原子尺寸方差(δAr)与价电子浓度标准差(δVEC)等特征的加入，使模型成功捕捉了高强度区间内晶格畸变能累积与电子结构均匀性对位错运动的协同影响，从而显著提升了数据稀疏区的外推预测可靠性。如图 5b 所示，旧模型在高塑性区呈现明显的预测偏差，预测值低于真实点，数据点(橙色)分布较为离散，表明模型对高塑性区间的 TWIP/TRIP 效应或位错滑移等变形物理机制缺乏有效的表征能力。而在新模型(图 5d)中，该区间的残差从 0~40%收窄至0~20%，数据点更紧密地分布在对角线附近。这一改进归因于输入特征中引入了电负性差异(δXa)与混合焓(ΔΔH)等物理描述符，使模型能够更准确地认知高塑性区间内化学短程有序对位错滑移的调控作用(层错能、马氏体相变)以及其他相关的塑性变形物理机制。此外，旧模型在强塑平衡区的残差分布存在部分离群点，而新模型在该区间的残差分布更为集中，离群点明显减少，拟合一致性得到进一步优化。新特征加入后，由于新特征隐式嵌入 HEAs“成分–组织”关联机制，模型精度大幅提升，且模型超越传统仅依赖成分、工艺建立模型，增强了模型的物理可解释性及外推能力。

2.3 模型可解释性分析及关键因素识别

尽管采用 XGBoost 建立的力学性能预测模型，性能表现优异，但其“黑箱”特性使得预测过程难以被直观理解，因此引入 SHAP 方法解释模型预测结果，如图 6 所示。图 6a 灰色条显示特征对模型预测的影响重要性排序，左轴从上往下显示，CR 和 AT 的 SHAP 绝对值均值之和为 274.1 MPa，占所有特

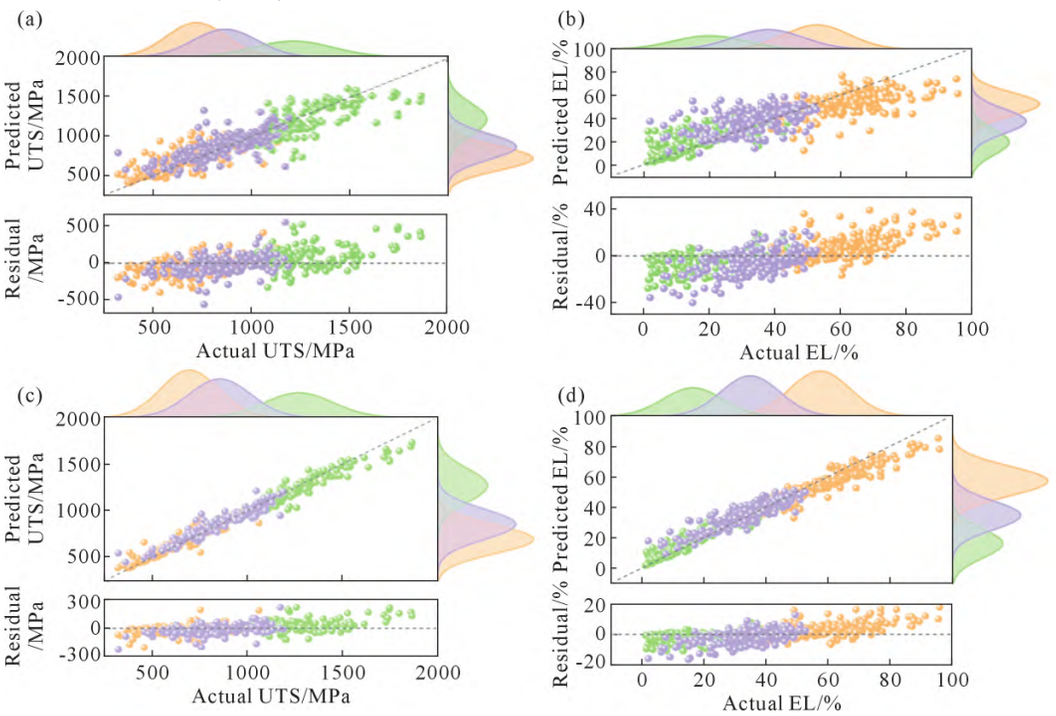

图 5 新旧特征建立模型后性能边际图：(a) 原特征 -UTS 预测值和实测值分组对比；(b) 原特征–伸长率预测值和实测值分组对比；(c) 重要特征 -UTS 预测值和实测值分组对比；(d) 重要特征–伸长率预测值和实测值分组对比。图中橙色点为 EL 较高、UTS 中等的高塑性区，绿色点为 UTS 较高、EL 中等的高强度区，紫色点为强–塑性平衡区

Fig.5 Performance marginal plots after model establishment using original and new features: (a) grouped comparison of predicted and measured UTS values using original features; (b) grouped comparison of predicted and measured elongation values using original features; (c) grouped comparison of predicted and measured UTS values using important features; (d) grouped comparison of predicted and measured elongation values using important features. In the figures, the orange points represent the high-plasticity region with high EL and moderate UTS, the green points represent the high-strength region with high UTS and moderate EL, and the purple points represent the strength-plasticity balanced region

中国知网 https://www.cnki.net

征 SHAP 绝对值均值总和的 71%，因此被识别为影响 UTS 预测的关键因素。进一步分析表明，CR 增量与 SHAP 值呈完全正相关。对于 AT，样本点分布红蓝相间，说明 AT 与 UTS 预测值呈非线性关系。图 6b 和 c 分别为 SHAP 值随 CR 和 AT 的变化趋势图。可见，随 CR 增加，其 SHAP 值缓慢增大。当 CR<50%时，其 SHAP 值小于 0，说明低变形量条件下，增大变形量，UTS 预测值降低；当 CR≥50%时，其 SHAP 值大于 0，说明高变形量条件下，增大变形量，UTS 预测值升高。这表明当 CR 超过 50%时，加工硬化效果才显著体现；低于 50%时，冷轧引入的位错塞积可能被后续退火过程完全回复，无法有效累积强化效果[27-28]。

相比 CR，AT 对 UTS 预测值的影响更加复杂。随着 AT 的升高，其 SHAP 值在正值范围先增后减，说明 UTS 预测值随之提高，且提高速度先增后减。在大于 800 ℃范围内，SHAP 值为负，说明 AT 升高，UTS 预测值降低。这一非线性关系可能是由于，低温退火时，冷轧引入的位错结构得以保留，加工硬化效果尚未被显著消除，因此对强度仍有较大贡献；中温退火位错密度进一步下降，再结晶软化，抵消部分位错强化效果，导致强度增加减缓；高温退火时，HEAs 发生完全再结晶后，随着温度继续升高，位错密度大幅度降低，晶粒发生粗化，强度降低[29-30]。

图 7 是 EL 预测的关键特征因素对预测值的影响作用分析结果。从图 7a 可以得出，CR 和 AT 为影响 EL 预测的关键因素，两者的 SHAP 绝对值均值之和为 15.74%，占所有特征 SHAP 绝对值均值总和的 64%。进一步分析表明，CR 增量与 EL 预测相应的 SHAP 值呈负相关。而 AT 与 EL 预测值呈现非线性关系。图 7b 显示，当 CR<50%，其 SHAP 值为正，说明随 CR 减小，对 EL 预测值增加的贡献增大，表明低变形量对塑性预测起提升作用；当 CR 超过50%后，SHAP 值由正转负，并随 CR 增大，负向贡献持

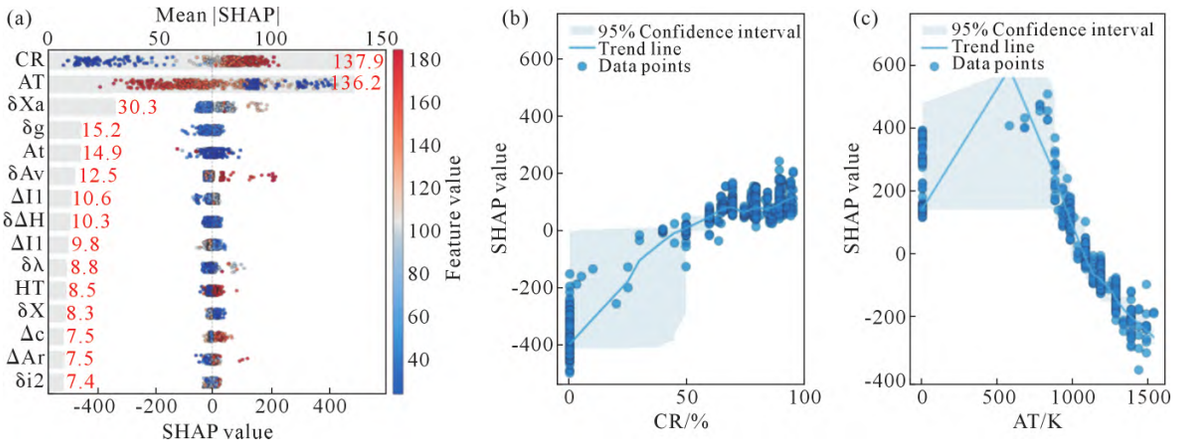

图 6 UTS 预测的关键特征因素对预测值的影响作用：(a) 所有特征重要性排序；(b) SHAP 值随 CR 变化趋势；(c) SHAP 值随 AT 变化趋势。在图(b)和(c)中，趋势线采用局部加权散点平滑法绘制，阴影区域是 100 次自助重采样估计的 95%置信区间

Fig.6 Influence of key feature factors on UTS prediction: (a) importance ranking of all features; (b) trend of SHAP values with respect to the CR; (c) trend of SHAP values with AT. In (b) and (c), the trend lines are fitted using locally weighted scatterplot smoothing, and the shaded areas represent the 95% confidence intervals estimated from 100 bootstrap resampling iterations

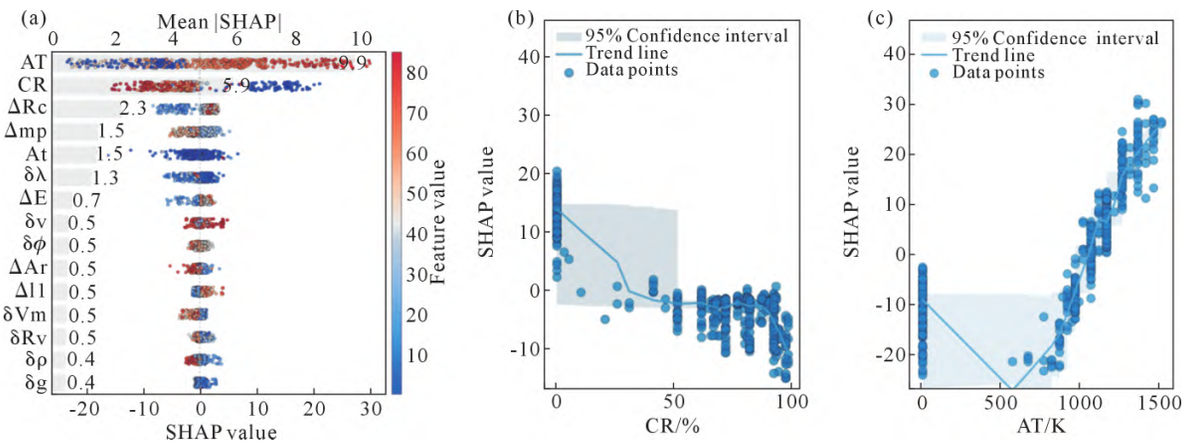

图 7 EL 预测的关键特征因素对预测值的影响作用：(a) 所有特征重要性排序；(b) SHAP 值随 CR 变化趋势；(c) SHAP 值随 AT 变化趋势。在图(b)和(c)中，趋势线采用局部加权散点平滑法绘制，阴影区域是 100 次自助重采样估计的 95%置信区间

Fig.7 Influence of key feature factors on EL prediction: (a) importance ranking of all features; (b) trend of SHAP values with respect to the CR; (c) trend of SHAP values with AT. In (b) and (c), the trend lines are fitted using locally weighted scatterplot smoothing, and the shaded areas represent the 95% confidence intervals estimated from 100 bootstrap resampling iterations

中国知网 https://www.cnki.net

续增加，表明高变形量显著降低塑性预测值。这是因为冷轧引入的大量位错在提高强度的同时，也导致位错缠结和加工硬化，限制了位错运动的自由程，从而降低塑性[30]。

AT 对 EL 预测值的影响同样呈现复杂的非线性特征，与 AT 对 UTS 的影响在非线性与多阶段演化方面的特点一致，但变化趋势相反。对于 EL，随AT 升高，SHAP 值先在负值区下降后上升，然后在正值区持续增加。这是由于低温退火时位错结构部分保留，塑性改善有限；中高温退火触发再结晶，无畸变晶粒取代变形组织，位错密度下降，塑性显著提升；完全再结晶后晶粒长大虽弱化强度，但有利于位错滑移，塑性进一步改善[29,31]。综合分析，CR 与 AT 对 UTS 和 EL 的影响截然相反，高 CR 提升强度但损害塑性，高 AT 提升塑性但削弱强度。

2.4 关键因素对力学性能的异质性因果效应分析

鉴于前述 SHAP 分析仅揭示了是关键因素(CR 和 AT)与力学性能之间的相关性，无法量化其因果效应。因此，引入 DML 和因果随机森林方法，量化每个工艺参数对力学性能的真实影响。本文选择 XGBoost 建立式(7)对应的预测模型，根据式(8)计算预测残差，利用式(9)构建因果森林，进行残差回归拟合，估计每个样本的因果效应，计算结果如表 2和图 8 所示。研究中的异质因果效应，是指在剔除成分、热处理等协变量的混杂影响后，CR 与 AT 对高熵合金 UTS 与 EL 的纯因果作用并非固定平均值，而是随不同成分–工艺条件呈现显著差异。同一工艺参数的变动，在不同合金体系、不同预处理状态下对性能的调控幅度存在明显区别，这种效应随样本条件变化的特性即为异质因果效应。其对材料设计的核心意义在于，突破传统平均化分析的局限，实现针对特定成分与初始组织的精准、定制化工艺调控，为高熵合金成分–工艺协同优化提供可解释、可量化的定量依据。表 2 中因果效应 θ 为特征增加一个单位后力学性能变化值。例如，AT 增加 1 K，UTS 下降 1.106 MPa。图 8a 和 b 分别为数据集中所有样本中 CR 和 AT 对 UTS 和 EL 影响的效应值分布。CR 每增加 10%，可使 UTS 产生 -13.0~92.0 MPa 的波动(平均效应值为 50.1 MPa)，伸长率产生 -5.02%~0.62% 的波动(平均效应值为 -0.29%)；AT 每升高 100 K，可使 UTS 下降 -164.9~-57.2 MPa(平均效应值为 -110.6 MPa)，EL 提升 5.2%~11.2%(平均效应值为 8.3%)。

为验证本文估计的关键因素对力学性能异质因果效应的可靠性，采用其他文献数据开展数据集外部验证[31-34]。所选文献涵盖 FCC 单相与 FCC+BCC 双相 HEAs，其中采用轧制工艺的合金记为 A1 和 A2，采用退火工艺研究的合金记为 A3 和 A4。将文献中成分与工艺参数通过物理特征工程构造后，输入已训练完成的因果推断模型，估计文献样本中 CR 和 AT 对力学性能的异质因果效应，并与文献实测性能变化量进行对比。结果如图 9 所示，实际 UTS 变化量(ΔUTS)均在因果效应拟合线附近，且预测的 ΔUTS 与实际 ΔUTS 间的 R^2 整体较高，均大于 0.99，这表明通过本文所提框架获得的异质因果效应具有较高的可靠性。如图 9d 所示，A3 和 A4 合金的 EL 变化量(ΔEL)估计值和实验值间 R^2 均为 0.95，略低于 ΔUTS 的拟合精度。这可能是因为 A4 合金

表2 HEAs力学性能因果效应估计

Tab.2 Estimation of causal effects on the mechanical properties of HEAs

Property	Key factor	Causal effect θ	Standard deviation	Upper bound	Lower bound	Unit
UTS	AT	-1.106	0.197	-0.572	-1.649	MPa/K
UTS	CR	5.011	2.632	9.264	-1.300	MPa/%
EL	AT	0.083	0.011	0.112	0.052	%/K
EL	CR	-0.288	0.110	0.062	-0.502	%/%

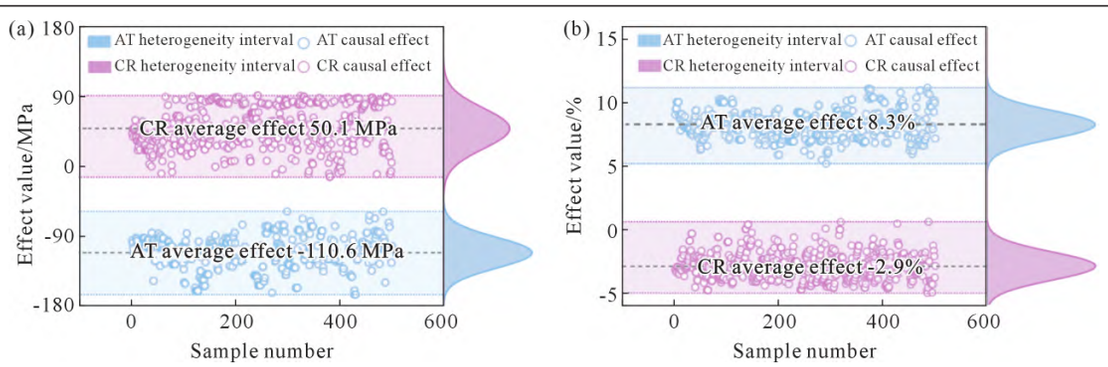

图 8 AT 和 CR 对 HEAs 力学性能的因果效应：(a) UTS; (b) EL

Fig.8 Causal effects of AT and CR on the mechanical properties of HEAs: (a) UTS; (b) EL

中国知网 https://www.cnki.net

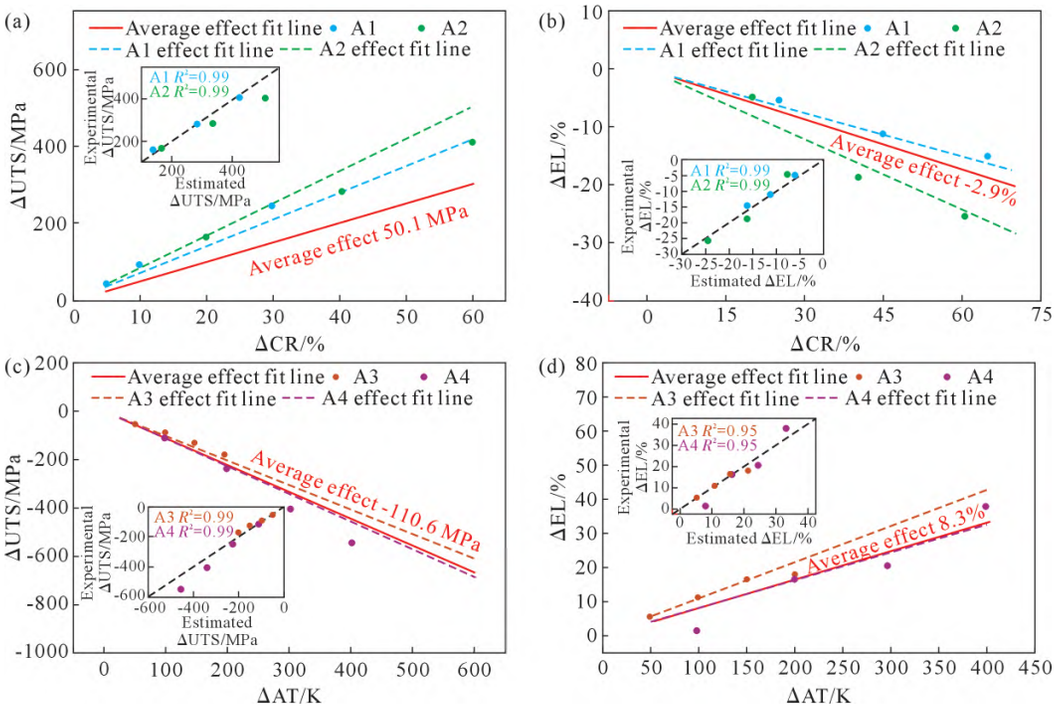

图 9 基于文献数据的 CR 和 AT 对 HEAs 力学性能预测因果效应的验证:(a) CR-UTS; (b) CR-EL; (c) AT-UTS; (d) AT-EL

Fig.9 Validation of the causal effects of CR and AT on the prediction of the mechanical properties of HEAs on the basis of literature data: (a) CR-UTS; (b) CR-EL; (c) AT-UTS; (d) AT-EL

成分中含有 0.3%(原子分数)的 Si,该元素在数据库并未出现,Si 的添加会降低层错能,促进平面滑移,并可能形成局部强化相或改变晶界结合状态,对退火过程中的塑性协调变形行为产生独立于训练规律的额外影响;A3 合金在冷轧前增加了 1 100 ℃、变形量 20%的热轧工序,该前置工艺预先改变了晶粒形态、位错密度与内部储能状态,形成与训练样本不同的初始微观组织,进而改变后续退火过程中的再结晶动力学与塑性响应路径。相比之下,上述成分与工艺差异并未明显削弱 ΔUTS 的估计精度,主要原因在于,抗拉强度对成分与工艺的响应更依赖固溶强化、位错强化等共性物理机制,这些机制已被模型中的物理描述符充分表征,因此预测鲁棒性更强;而延伸率对微观组织局部演化、界面状态、变形协调性等细节更为敏感,未训练元素与前置热轧工艺带来的特殊组织状态会显著改变塑性演化路径,超出模型现有学习范围,最终导致拟合精度略有下降。文献数据验证结果表明,本文采用所提框架估计的工艺参数与力学性能间的因果效应具有良好的普适性与可靠性,能够为不同相结构的 HEAs 体系中工艺优化提供可信的定量依据。

3 结论

(1)通过构造的物理描述符显著提升了预测精度。采用元素本征物理化学属性构造了 56 个物理描述符,经特征筛选优化后,显著提升了模型预测精度。在性能最优的 XGBoost 模型上,抗拉强度与伸长率的预测决定系数 R^2 分别提升了 23%和 36%。

(2)识别出影响预测的关键因素及其对性能预测的影响趋势。SHAP 分析识别出冷轧变形量 CR 和退火温度 AT 为影响力学性能的关键工艺参数。CR 对 UTS 的促进和 EL 的抑制在 50%变形量处阈值转折,AT 对 UTS 的先增后减在 800 ℃处转折,对 EL 趋势相反。

(3)量化了关键因素对力学性能影响的异质因果效应。使用 CRF-DML 方法计算出 CR 每提高10%,抗拉强度变动 -13.0~92.0 MPa(均值 50.1 MPa),伸长率变动 -5.02%~0.62%(均值 -0.29%);AT 每升高 100 K,抗拉强度变动 -164.9~-57.2 MPa(均值 -110.6 MPa),伸长率变动 5.2%~11.2%(均值 8.3%)。个体处理效应在样本间呈现显著差异,验证了工艺参数对力学性能影响的异质性特征。

参考文献:

[1] ZHANG Y, ZUO T T, TANG Z, GAO M C, DAHMEN K A, LIAW P K, LU Z P. Microstructures and properties of high-entropy alloys[J]. Progress in Materials Science, 2014, 61(2): 1-93.

[2] 王松宇,吴宜霞,何峰. 增材制造析出强化型高熵合金非均匀组织、析出行为及力学性能研究进展[J]. 铸造技术,2025, 46(8): 774-788.
WANG S Y, WU Q X, HE F. Review of the heterogeneous microstructures, precipitation behavior and mechanical properties of additively manufactured precipitation-strengthened high-entropy

中国知网 https://www.cnki.net

alloys[J]. Foundry Technology, 2025, 46(8): 774-788.

[3] YEH J W, CHEN S K, LIN S J, GAN J Y, CHIN T S, SHUN T T, TSAU C H, CHANG S Y. Nanostructured high-entropy alloys with multiple principal elements: novel alloy design concepts and outcomes[J]. Advanced Engineering Materials, 2004, 6(5): 299-303.

[4] HU M W, TAN Q Y, KNIBBE R, XU M, JIANG B, WANG S, LI X, ZHANG M X. Recent applications of machine learning in alloy design: A review[J]. Materials Science and Engineering: R: Reports, 2023, 155: 100746.

[5] 张勇. 高熵合金的发现和发展[J]. 四川师范大学学报(自然科学版), 2022, 45(6): 711-722, 708.
ZHANG Y. Discovery and development of high entropy alloys[J]. Journal of Sichuan Normal University (Natural Science), 2022, 45(6): 711-722, 708.

[6] LIU H, LIU J, LI X, CHEN P J, YANG H F, HAO J B. Effect of heat treatment on phase stability and wear behavior of laser clad $AlCoCrFeNiTi_{0.8}$ high-entropy alloy coatings[J]. Surface and Coatings Technology, 2020, 392: 125758.

[7] 聂帅, 刘浩翔, 武宇浩, 刘栩东, 贺一轩, 王军, 李金山. 退火温度对 Al-Co-Fe-Ni 共晶高熵合金组织性能的影响[J]. 铸造技术, 2024, 45(7): 639-646.
NIE S, LIU H X, WU Y H, LIU X D, HE Y X, WANG J, LI J S. Effect of annealing temperature on the microstructure and properties of Al-Co-Fe-Ni eutectic high-entropy alloy[J]. Foundry Technology, 2024, 45(7): 639-646.

[8] 孙沁瑶, 杜大帆, 彭望君, 何林, 董安平, 赵凯. 热处理对激光增材制造非等原子 FeNiCoAlTaB 高熵合金组织性能影响[J]. 铸造技术, 2025, 46(8): 765-773.
SUN Q Y, DU D F, PENG W J, HE L, DONG A P, ZHAO K. Heat treatment effects on microstructure and mechanical properties of non-equiatomic FeNiCoAlTaB high entropy alloy fabricated by additive manufacturing[J]. Foundry Technology, 2025, 46(8): 765-773.

[9] HAN P, WANG W, DENG J Y, QIAO K, ZHOU K, LIN J, ZHANG Y Y, QIANG F M, WANG K S. Achieving excellent superplasticity and predicting the elongations in ultrafine-grained Ti-4.5Al-3V-2Mo-2Fe titanium alloy prepared by friction stir processing[J]. Journal of Materials Processing Technology, 2025, 336: 118701.

[10] YUAN R H, WANG B, LI J S, SUN P, LIU Z, DING X D, XUE D Z, LOOKMAN T. Machine learning-enabled design of ferroelectrics with multiple properties via a Landau model[J]. Acta Materialia, 2025, 286: 120760.

[11] WANG C C, SHEN C G, CUI Q, ZHANG C, XU W. Tensile property prediction by feature engineering guided machine learning in reduced activation ferritic/martensitic steels[J]. Journal of Nuclear Materials, 2020, 529: 151823.

[12] TIAN Y, HU B, DANG P F, DONG S Y, SUN S, XUE D Z, LOOKMAN T, ZHANG T Y. Design of shape memory alloys with enhanced thermal management properties via adaptively constrained multi-objective optimization[J]. Acta Materialia, 2026, 306: 121874.

[13] REN W, ZHANG Y F, WANG W L, DING S J, LI N. Prediction and design of high hardness high entropy alloy through machine learning[J]. Materials & Design, 2023, 235: 112454.

[14] KHAKUREL H, TAUFIQUE M F N, ROY A, BALASUBRAMANIAN G, OUYANG G Y, CUI J, JOHNSON D D, DEVANATHAN R. Machine learning assisted prediction of the Young's modulus of compositionally complex alloys[J]. Scientific Reports, 2021, 11(1): 17149.

[15] BHANDARI U, RAFI M R, ZHANG C, YANG S. Yield strength prediction of high-entropy alloys using machine learning[J]. Materials Today Communications, 2021, 26: 101871.

[16] BOBBILI R. Hardness prediction of refractory high entropy alloys through gradient boosting and SHAP analysis based machine learning[J]. International Journal of Refractory Metals and Hard Materials, 2026, 134: 107475.

[17] FLORES N, MULA D S, XU W, BIBHU S, LEWIS D, SALINAS A E, MITRA S, MAHAT R, KALIDINDI S R, WILKERSON J, OTHERS. Data-driven insights into composition-property relationships in FCC high entropy alloys[J]. Scripta Materialia, 2026, 274: 117136.

[18] LUNDBERG S M, LEE S I. A unified approach to interpreting model predictions[J]. Advances in Neural Information Processing Systems, 2017, 30: 4768-4777.

[19] BAKR M, SYARIF J, HASHEM I A T. Prediction of phase and hardness of HEAs based on constituent elements using machine learning models[J]. Materials Today Communications, 2022, 31: 103407.

[20] VICTOR C, DENIS C, MERT D, ESTHER D, CHRISTIAN H, WHITNEY N, JAMES R. Double/debiased machine learning for treatment and structural parameters[J]. The Econometrics Journal, 2018, 21(1): 1-68.

[21] LY T K, NGUYEN H C, YAMAMOTO T. A causal inference approach to assess the effects of atomic concentration changes on the hardness of high-entropy alloys[A]//International Conference on Computational Collective Intelligence[C]. Cham: Springer, 2025: 152-166.

[22] JI Y, SHAFIEEZADEH A. Robust treatment assignment with uncertainty-aware causal forests: Joint optimization of accuracy and estimation uncertainty[J]. Expert Systems with Applications, 2026, 303: 130578.

[23] WANG J , KWON H, KIM H S, LEE B J. A neural network model for high entropy alloy design[J]. npj Computational Materials, 2023, 9(1): 60.

[24] WANG Y M, LI K M , SOISSON F, BECQUART A S. Combining DFT and CALPHAD for the development of on-lattice interaction models: The case of Fe-Ni system[J]. Physical Review Materials, 2020, 4: 113801.

[25] MA D C, YAO M J, PRADEEP K G, TASAN C C, SPRINGER H, RAABE D. Phase stability of non-equiatomic CoCrFeMnNi high entropy alloys[J]. Acta Materialia, 2015, 98(1): 288-296.

[26] HE F, YANG Z S, LIU S F, CHEN D, LIN W T, YANG T, WEI D X, WANG Z J, WANG J C, KAI J J. Strain partitioning enables excellent tensile ductility in precipitated heterogeneous high-entropy alloys with gigapascal yield strength[J]. International Journal of Plasticity, 2021, 144: 103022.

[27] 康亮, 梁霄鹏, 李慧中, 吴庆波. 轧制及退火对 $FeCoCrNiN_{0.07}$ 高熵合金组织及力学性能的影响[J]. 热加工工艺, 2024, 53(17):

中国知网 https://www.cnki.net

94-97.
KANG L, LIANG X P, LI H Z, WU Q B. Effects of rolling and annealing on microstructure and mechanical properties of $FeCoCrNiN_{0.07}$ high-entropy alloy[J]. Hot Working Technology, 2024, 53(17): 94-97.

[28] XIAO Q, WANG L, LIANG Y J, XUE Y. Annealing hardening in cryo-rolled high-entropy alloys by belated deformation twinning [J]. Materials Science and Engineering: A, 2021, 801: 140403.

[29] ZHAO Y N, CHEN Z W, YAN K, LE W, NASEEM S, ZHANG H L, YANG L L. Investigation on microstructure, superior tensile property and its mechanism in $Al_{0.3}$CoCrFeNi high-entropy alloy via thermo-mechanical processing[J]. Materials Science and Engineering: A, 2023, 866(23): 144690.

[30] SUN S J, TIAN Y Z, LIN H R, DONG X G, WANG Y H, WANG Z J, ZHANG Z F. Temperature dependence of the hall-petch relationship in CoCrFeMnNi high-entropy alloy[J]. Journal of Alloys and Compounds, 2019, 806: 992-998.

[31] MOAZZEN P, TOROGHINEJAD M R, ZARGAR T, SADEGHI F, MOHAMMADI M. Tuning mechanical behavior of an FCC high entropy alloy: Insights from roll deformation and texture[J]. Materials Science and Engineering, A. 2024, 913:147073.

[32] LV Y K, LEI Y T, GUO Y Y, WANG W L, SONG P T, DING R G, CHEN J. Achieving superior strength-ductility balance of Co-Cr-Fe-Ni high entropy alloy via annealing[J]. Journal of Materials Research and Technology, 2024, 29: 471-475.

[33] LIAO L, CHENG Y, DAI S, KHAN M A, ZHANG H, LI F. Effect of cold-rolling and annealing temperature on microstructure, texture evolution and mechanical properties of FeCoCrNiMn high-entropy alloy[J]. Journal of Materials Research and Technology, 2024, 33: 683-697.

[34] WANG L, QIN J W, WANG Y L, CHEN X H, WANG Z D. Influence of Si addition on the microstructure, mechanical and wear properties of as-cast $Al_{0.43}CoCrFeNi_{2.1}$ high-entropy alloys and performance enhancement by cold rolling and annealing[J]. International Journal of Minerals, Metallurgy and Materials, 2025, 32(12): 3002-3016.

(责任编辑:李亚敏)

中国知网　https://www.cnki.net