

TAExplorer: 影响钛合金性能的关键因素可视化探索

何逸蕾¹, 宁榛^{2,3,4}, 吴蝶^{2,3,4}, 张煜¹, 段庆潮¹, 蒲剑苏¹, 朱焱麟^{2,3,4*}

(1. 电子科技大学计算机科学与工程学院, 四川 成都 611731; 2. 成都先进金属材料产业技术研究院股份有限公司, 四川 成都 610300; 3. 钒钛资源利用国家重点实验室, 四川 攀枝花 617000; 4. 攀钢集团研究院有限公司, 四川 成都 610301)

摘要: 钛合金具有高强度, 优秀的耐腐蚀性和耐热性等特点, 因此被航空航天、化工和医疗等领域广泛应用。由于钛合金的性能取决于它的结构特征, 不同应用领域对于钛合金性能的要求不尽相同, 专家们一直致力于通过试验试错方法来设计和获得具有目标性能的新材料, 以及寻找影响钛合金性能的工艺因素。然而钛合金的制作工艺复杂, 时间成本过长, 利用传统方法来找到合适的材料非常困难。目前基于机器学习的方法被引入并用于材料预测, 但是为领域专家设计的、能够对机器学习模型进行直观性能比较和分析的学习工具却很少。为此提出基于钛合金的交互式可视化分析系统 TAExplorer, 可以为专家提供多方面的参考。该系统采用多方面的可视化方案, 旨在从各个角度进行分析, 例如特征分布、数据相似性、模型性能以及结果呈现。专家们通过实际实验室试验进行了案例研究, 最终结果证实了该系统的有效性和实用性。

关键词: 钛合金; 材料数据; 可视化; 机器学习

中图分类号: TF823, TP391.9

文献标志码: A

文章编号: 1004-7638(2025)05-0123-10

DOI: 10.7513/j.issn.1004-7638.2025.05.013

开放科学 (资源服务) 标识码 (OSID):



听语音
与作者互动
聊科研

TAExplorer: visualizing key factors in titanium alloy performance

HE Yilei¹, NING Zhen^{2,3,4}, WU Die^{2,3,4}, ZHANG Yu¹, DUAN Qingchao¹,
PU Jiansu¹, ZHU Yanlin^{2,3,4*}

(1. School of Computer Science and Engineering, University of Electronic Science and Technology of China, Chengdu 611731, China; 2. Chengdu Advanced Metal Materials Industry Technology Research Institute Co., Ltd., Chengdu 610300, Sichuan, China; 3. State Key Laboratory of Vanadium and Titanium Resources Comprehensive Utilization, Panzhihua 617000, Sichuan, China; 4. Pangang Group Research Institute Co., Ltd., Chengdu 610031, Sichuan, China)

Abstract: Titanium alloys have the characteristics of high strength, excellent corrosion resistance and heat resistance, so they are widely used in aerospace, chemical and medical fields. Since the properties of titanium alloys depend on their structural characteristics and the requirements for titanium alloy properties vary from application to application, researchers have been working on designing and obtaining new materials with the targeted properties through experimental trial-and-error methods, as well as searching for process factors affecting the properties of titanium alloys. However, the production process of titanium alloy is complex, time-consuming, and it is very difficult to find the appropriate material by traditional methods. Machine learning based methods have currently being introduced and used for material prediction, but there are few learning tools designed for researchers that are capable of intuit-

收稿日期: 2025-03-20; 修回日期: 2025-07-30; 接受日期: 2025-07-30

作者简介: 何逸蕾, 2000 年出生, 女, 四川西昌人, 博士研究生, 研究方向: "AI+工业应用", E-mail: yilei2022@163.com;

* 通讯作者: 朱焱麟, 1989 年出生, 男, 重庆合川人, 博士, 工程师, 研究方向: 材料基因工程、钒钛产线数字孪生, E-mail: ali.yanlinzhu@outlook.com。

ively comparing and analyzing the performance of machine learning models. Herein, we propose TAEplorer, an interactive visualization and analysis system based on titanium alloys that can provide experts with multifaceted references. Our system employs a multifaceted visualization scheme that aims to analyze from various perspectives, such as feature distribution, data similarity, model performance, and result presentation. Experts have conducted case studies through practical laboratory experiments, and the final results confirm the effectiveness and practicality of our system.

Key words: titanium alloy, materials data, data visualization, machine learning

0 引言

自 20 世纪 50 年代以来,钛作为一种关键的结构金属材料得到迅速发展。凭借高比强度、优异的耐蚀性和良好的耐热性能,钛合金被广泛应用于航空航天^[1-2]、化工^[3]、医疗^[4]等领域。随着应用需求的多样化,钛合金的微观结构与化学成分设计成为研究的核心问题。钛合金的微观结构(如晶粒尺寸、取向、相组成与分布)直接影响其力学性能、耐蚀性和高温稳定性,而这些结构特征又取决于化学成分和热机械加工工艺^[5-7]。通过精确调控成分配比与工艺参数,才能实现性能的优化与适配。

现有钛合金大致分为三类: α 型钛合金(密排六方结构),具备较好的韧性和塑性; β 型钛合金(体心立方结构),具有更高的强度与硬度;以及 $\alpha+\beta$ 型钛合金,兼具二者特征^[5]。合金性能在很大程度上依赖于化学成分的调控。例如,Al 的添加可显著改善相变行为与晶粒结构,从而提升强度与塑性;而 Fe、O、N 等杂质元素则可能削弱耐蚀性与热稳定性^[6]。此外,加工工艺(如轧制温度与压下率)对组织演化同样具有决定性作用。高温轧制有助于晶粒再结晶,增强塑性与韧性;低温轧制则倾向于细化晶粒,提升材料强度与硬度。不同的压下率则会导致组织均匀性与变形程度的差异,从而对最终性能产生重要影响^[8-15]。

然而,传统的钛合金研发主要依赖经验与试验试错方法,这种方式周期长、成本高,难以应对现代钛合金设计所需的多目标、多因素复杂性。随着大数据和计算材料学的发展,数据驱动的机器学习方法成为钛合金研究的重要突破口。已有研究表明,机器学习能够在成分—组织—性能关系建模中发挥重要作用。ZHU 等人提出了一种基于高通量试验与 BP 神经网络的钛合金设计方法,成功开发出兼具强度与塑性的合金^[16]。ZOU 等人利用数据挖掘揭示了原子和电子层面的组成—结构—性能关系,为先进合金设计提供了新的原则^[17]。OUTEIRO 等人基于试验设计与回归建模方法优化了钛合金的加工过程,有效预测了不同切削条件下的残余应力^[18]。

LIU 等人将 XGBoost 算法用于 β 型医用钛合金弹性模量预测,显著提升了模型泛化能力^[19-20]。PATURI 等人则综述了机器学习在增材制造中的应用,总结了其在材料开发中的潜力^[21]。这些工作充分展示了机器学习在钛合金研究中的前景,但多数研究往往只关注单一因素,而钛合金的性能实际由成分与工艺多因素共同决定。

与此同时,可视化分析技术的发展为机器学习在材料领域的应用提供了有力支持。机器学习模型通常存在“黑箱”问题,难以解释预测的内在机制,而可视化能够直观揭示特征与性能之间的关系,并比较不同算法的表现。已有学者对机器学习可视化方法进行了系统梳理与分类^[22-27],提出了模型构建前、中、后的分析手段。YUAN 等人总结了机器学习可视化的整体框架^[28],SUN 等人提出了“分析空间”概念以揭示研究趋势^[29],ANDRIENKO 等人利用交互式可视化分析复杂运动数据^[30],PREIM 和 LAWONN 则将可视化应用于公共卫生,证明了其在跨领域中的广泛价值^[31]。在材料研究中,可视化有助于识别关键影响因素,揭示潜在规律,并为试验设计提供直观参考。

综上所述,钛合金的性能优化不仅依赖成分与工艺的协同调控,还需要借助机器学习与可视化技术的结合。笔者提出 TAEplorer,一个面向钛合金成分与工艺因素的可视化探索系统。该系统以构建的钛合金成分与工艺数据集为基础,集成了机器学习预测与交互式可视化分析,能够直观揭示不同因素对性能的作用规律,并为材料科学领域的专家提供辅助决策。该系统实现了对材料特征、模型性能和预测结果的统一展示,并在实际案例中证明了其有效性,为快速筛选潜在合适的成分与工艺组合、加速试验验证提供了新的解决方案。

1 任务分析及系统概览

1.1 任务分析

TAEplorer 系统是通过与材料领域专家合作共同努力开发的。材料科学领域的专家希望通过机器学习过程来预测钛合金合成的影响因素,并且能

够直观有效地观察到钛合金的各种属性及力学性能,能够对钛合金材料进行一些探索和分析,笔者据此拓展了不同层次的分析任务,总结如下:

1) 展示钛合金之间的相关关系

通过展示不同钛合金之间的相关关系,该系统可以发现它们之间的性质和结构相似性,从而找出更具使用价值的钛合金。通过对一些相似钛合金的特性进行分析,材料科学家能够更快速、更经济地发现新的钛合金材料,并为后续的试验打下基础。这种方法不仅可以有效提高不同成分钛合金材料之间的相互关系,还可以为新材料设计和工程应用提供重要的参考,从而促进材料领域的进步和创新。

2) 展示和分析不同钛合金材料的特性

通过详细介绍每种钛合金材料的具体属性,该系统可以直观地呈现所有特征,包括其空间结构、加工工艺等方面的信息。通过了解每种钛合金材料的特性,专家们可以更准确地评估其在特定应用领域的适用性,并选择最合适的材料进行进一步的研究和验证。这种方法不仅可以帮助专家们更快速地确定合适的研究方向,还可以降低试验和研发过程中的不确定性和风险。此外,通过对钛合金材料的属性进行详细介绍,还可以促进不同领域之间的交流和合作。材料领域的专家可以从其他领域的经验和见解中获益,从而更好地解决自己的研究问题和挑战。

3) 判断钛合金加工因素的影响

在传统的钛合金加工工艺中,固溶时间、固溶温度、时效温度以及时效时间等加工因素都对钛合金最终的结构和特性产生不同程度的影响。鉴于钛合金在不同领域具有不同的用途,材料科学家可以通过评估每种加工因素对其产生的影响来优化加工过程。针对特定的应用需求,科研工作者可以根据加工因素的不同组合来实现钛合金的定制加工,以满足不同领域的需求。例如,在航空航天领域,需要高强度和耐高温性能的钛合金,因此可以优化固溶和时效参数以提高材料的强度和耐热性。而在医疗领域,需要具有良好生物相容性和耐腐蚀性能的钛合金,则可以调节固溶和时效条件以改善材料的表面特性和生物相容性。

4) 对于不同的预测结果进行筛选

在机器学习的领域中,存在着多种模型构建的方法,这使得科研工作者在选择算法时常常感到困惑。然而,通过可视化分析,该系统能够直观地比较各种模型的评价指标,从而更好地选择适合特定数据集的算法模型,以达到最高的预测准确度。通过

可视化展示各种模型的评价指标,研究者可以清晰地看到它们在不同数据集上的表现。这种直观的比较有助于研究者更准确地评估每个模型的优缺点,并选择最适合当前任务的算法。例如,对于某些数据集,决策树模型可能表现更好,而对于其他数据集,逻辑回归或支持向量机可能更适合。

通过集成构建适应于钛合金材料数据的机器学习模型来预测钛合金关键力学性能,并通过构建TAExplorer可视化系统来帮助材料科研人员开发新材料并直观理解材料设计过程中的关键影响因素,从而提升钛合金研发的效率。

1.2 系统概览

在明确研究任务以后,笔者提出了一个可视化框架,使专家能在系统中自由探索,有效地实现钛合金材料的分析和预测。系统流程如图1所示。首先,通过查找一些文献和进行大量试验、计算得到一组数据,用这组数据构建了一个关于材料成分、结构以及热处理工艺的数据库,用于建立力学性能预测模型。同时,设计一种可视化方案来表示这些信息,从而为专家提供一套全面的钛合金分析与预测系统。①研究开发了定制化的散点图来表示钛合金材料之间的相关关系,距离越近表示具有更相似的性质和属性(T1);②提供一些交互方式,通过点击能够在面板上显示出选中钛合金的具体成分和加工工艺(T2);③通过调整控制台的参数可以实现对钛合金合成影响因素的探索(T3);④将机器学习模型的预测结果集成到了面板当中,能够通过数据本身和抽象化的雷达图形式对预测的结果进行筛选和判断(T4)。

2 TAExplorer 系统

2.1 原始数据收集及处理

2.1.1 数据集构建

由于试验数据具有一些局限性,例如实验室中的材料测试通常在受控条件下进行,这些条件可能与实际工业应用中的条件不同。在实验室里进行的测试可能无法完全模拟材料在实际工作条件下的表现,包括温度、压力、化学环境、机械应力等因素。同时,试验数据往往基于较小的样本量,不能完全反映材料在大规模生产和应用中的行为。在实验室中,研究人员可能使用少量样本进行测试,结果可能不能代表材料在实际生产中的大批量性能。最重要的是试验数据可能受到人为误差(如操作误差、样品制备误差等)和系统误差(如仪器校准问题、数据采集设备精度不足等)的影响。这些误差可能导致数

据不精确或存在偏差。

本研究的数据集建立在工业数据上,工业数据的优势在于它直接来源于材料在真实使用条件下的表现,因此对材料设计、选择和优化具有更直接的指导意义。并且由于基于大规模的生产和应用,工

业数据往往更加全面和具代表性,有助于发现材料性能的普遍规律和异常表现。虽然试验数据在材料研究和开发的早期阶段非常重要(因为它可以快速筛选材料、优化工艺等),但工业数据通常在最终的材料应用和性能评估中更为关键和可靠。

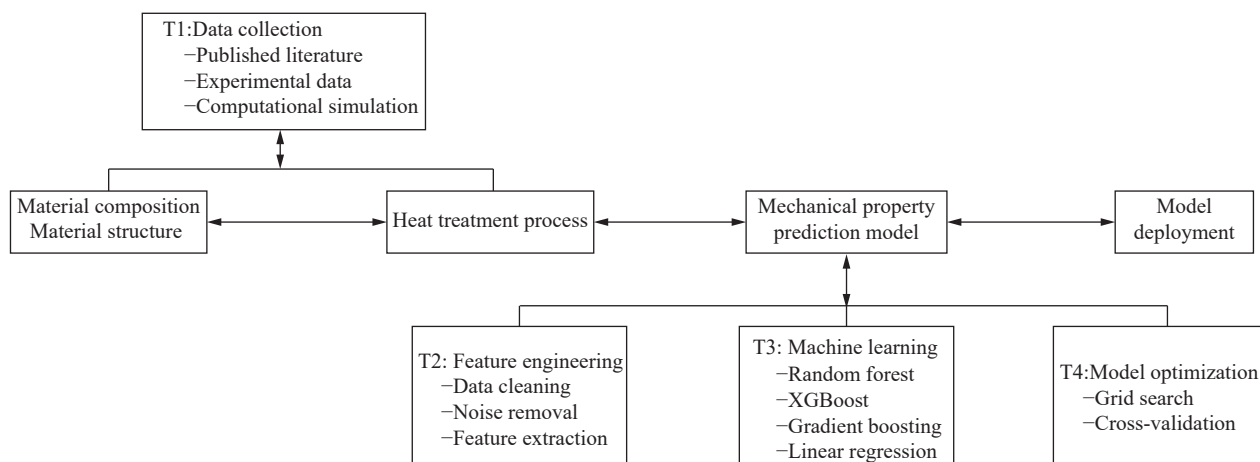


图 1 钛合金材料性能预测与可视化系统流程

Fig. 1 Workflow of titanium alloy performance prediction and visualization system

通过查询参考文献、实际工业生产以及计算模拟的方式,获取了 817 种钛合金成分-工艺-力学性能数据,这些数据涵盖了 172 种特征参数,如固溶处理温度、固溶时间、时效温度、时效时间、轧制温度、轧制压下率等,以及合金中包含的各种元素,如 Al、Sn、Zr、Mo、V、Cr、Fe、Si、Cu、Nb、Ta、In、W、O、C、H、Pd、Ni、Mn、N、B、Bi、Co 等。

2.2 可视化系统构建

研究设计可视化界面来呈现模型的预测结果并支持更详细的特征探索,如图 2 所示。图 2 显示了该系统的视觉界面,其中包括一个控制面板和六个主要视图。

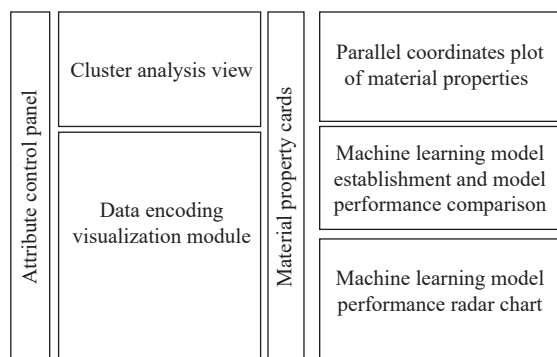


图 2 钛合金性能可视化探索系统(TAEplorer)界面分区示意

Fig. 2 Interface of the TAEplorer system for titanium alloy performance exploration

2.2.1 属性选择控制面板

属性选择控制面板视图主要为用户提供一些定

制化的选择,根据他们的需求和想法来实现更好的体验。具体地,用户可以选择控件来调整(平行坐标视图)的显示效果。他们可以调整簇的数量来探索更多模式。此外,用户可以更改投影和算法,并选择不同的最终算法应用于测试集。与此同时,聚类视图和预测网格视图将发生相应变化。

2.2.2 聚类分析视图

聚类分析是一种典型的无监督学习方法,在许多领域得到了很好的应用,其输出原理为:首先定义一种相似性度量方法,用于评估数据点之间的相似程度,具有某些相似性的样本会被分组到同一簇中,而这些样本的类别未知(T1)。在对高维数据进行聚类时,通常会面临两个典型问题,高维数据的冗余性和稀疏性。为解决这些问题,该系统使用降维来帮助去除不相关和冗余的特征,从而提高聚类效果并降低计算成本。在本文使用的数据集中,每个数据都包含了三四十种不同的属性和特征,通过主成分分析(Principal Component Analysis, PCA)模型来对数据进行降维,然后使用 K-means 算法对它们进行聚类。预先计算出最佳簇数是三个,通过物理位置上的距离来衡量数据点之间的相似度。通过聚类分析,可以将钛合金材料样本划分为不同的群组或簇,有助于识别材料之间的相似性和差异性,可以发现材料的潜在规律和关联性,为材料的设计和 optimization 提供指导,同时还能找到具有相似性或结构的材料,从而为新材料的发现和 design 提供参考。

同时,在聚类视图中,笔者为每种材料单独设计了数据编码。最开始,数据编码只是一个简单的散点,用不同的颜色边框来表示模型预测结果。经过与材料科学领域专家的密切讨论,以迭代方式收集他们对视觉设计的反馈,笔者认为原始设计包含的视觉信息有限,材料科学领域的专家需要更丰富的视觉信息来了解特征和原子结构,以评估和设计潜力材料。因此,进一步改进了视觉编码设计,如图3所示。此外,当前的视觉设计受到了先前多维数据可视化研究的启发。目前每种素材的视觉编码设计主要包含四个部分(T2),即最外圈上部38个与钛合金屈服强度最相关的特征、第二外圈44个与钛合金抗拉强度最相关的特性、最内圈材料名称以及下方代表屈服强度和抗拉强度的两个弧块。该系统能够通过长度对比呈现对屈服强度和抗拉强度性能影响最大的关键特征,并且利用弧块的高度来表示屈服强度和抗拉强度的相对大小。中心圆的颜色代表该种钛合金的聚类类别,此处Ti95Cu5,为 $\alpha+\beta$ 强化钛合金,用粉色来表示。这个视图可以通过分析两种材料的相对位置推测它们是否具有类似的力学性能,并且通过鼠标悬停可以直接观察到这种相似性,为试验人员选择试验材料提供了思路。

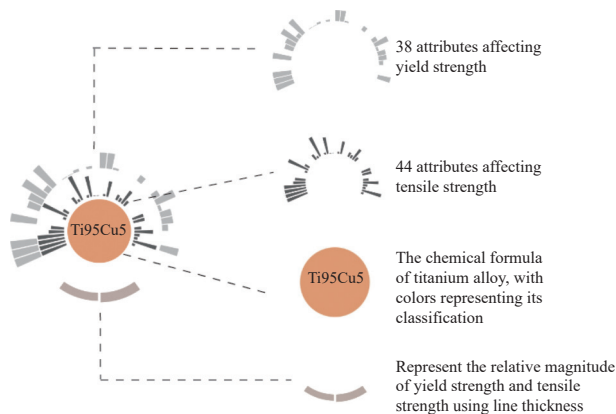


图3 钛合金性能属性的视觉编码示意
Fig. 3 Visual encoding of titanium alloy properties

2.2.3 材料属性卡片视图

通过点击上述聚类视图中的某一个材料,其具体信息将会显示在相应区域,其界面如图4所示,上半部分的两层柱状图分别表示影响材料屈服强度的38种属性值和影响材料抗拉强度的44种属性值,这些数据都进行了归一化处理,以方便展示。这些条状表明哪些特征对聚类的贡献最大,并且识别了与不同聚类形成对比的特征。从这个角度来看,可以根据具有多个特征的数据点的相似性来检测簇并感知每个簇的特征。在卡片的下半部分罗列出材料

的化学式、抗拉强度、屈服强度以及一些相关的加工工艺具体数值,通过纵向对比可以挖掘出究竟哪种因素对于钛合金性能的影响起到了重要作用。

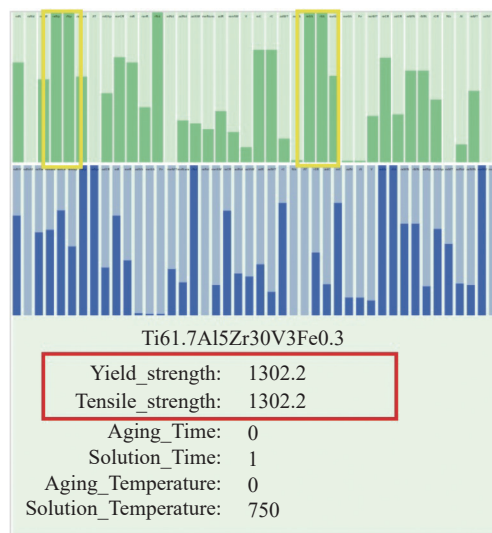


图4 钛合金样本属性及性能可视化界面示例
Fig. 4 Visualization example of titanium alloy sample properties and performance

2.2.4 平行坐标视图

衡量钛合金材料最重要的两个属性分别是屈服强度和抗拉强度。纯钛的抗拉强度大约为265~353 MPa,而一般钛合金为686~1 176 MPa,目前最高可达1 176 MPa。平行坐标是分析和显示多元数据非常有用的可视化工具,它可以直观地展示数据在不同轴上的分布情况,反应多个数据之间的关系。利用平行坐标视图可统计在不同区间内钛合金材料的综合情况。如图5所示,每一列属于一个属性,每个属性的值对应该轴上的位置。每个数据项都是一条穿过多个坐标轴的线。这里分别用两列数据来表示屈服强度和抗拉强度,蓝色的折线表示屈服强度的变化趋势,黄色的线表示抗拉强度的变化趋势,其范围趋势对最后的标签分类起决定性作用。平行轴的最后一系列显示标记为0,1,2的训练集的具体比例,他们分别表示最终数值落在[0, 800)、[800, 1 600)以及[1 600, 2 700]区间的数据。可以更改控制面板上的选项来去顶平行坐标视图中显示哪些数据、线条的透明度以及线条显示的模式。此外,当用户单击散点图中的材料时,代表该材料所对应的线会在平行坐标视图中红色突出显示。这个视图为专家寻找特定性能的材料提供了便利,例如通过观察其区域特征可以得出抗拉强度分布在[800, 1 600)的钛合金大都具有什么类型的特征,或者其化学元素占比有什么规律,而这些信息能够帮助材料科学领域专家设计性能相似的新材料。

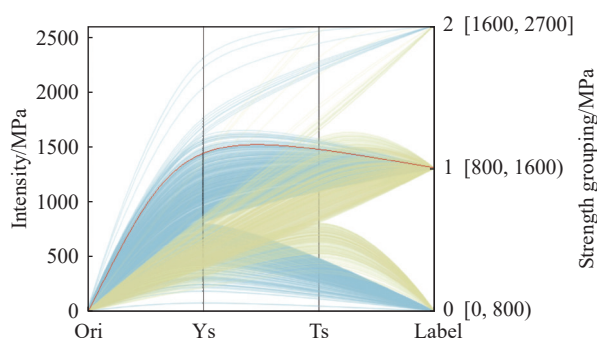
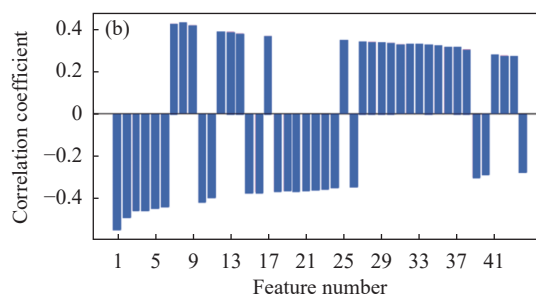
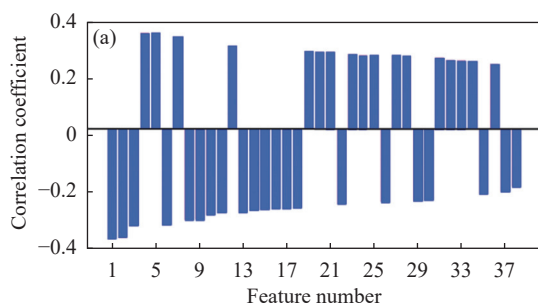


图 5 钛合金性能的平行坐标视图

Fig. 5 Parallel coordinates view of titanium alloy properties

2.2.5 机器学习模型建立及模型对比视图

首先在数据集基础上进行特征选择。由于本研究的目标之一是对钛合金的抗拉强度和屈服强度进行预测,因此在这 172 种特征中存在许多与抗拉强度和屈服强度关联性比较弱的特征,笔者需要根据以往的经验并通过计算 172 种特征与两种力学性能的皮尔逊相关关系,对特征进行进一步的筛选。



(a) 屈服强度; (b) 抗拉强度

图 6 屈服强度、抗拉强度相关系数大于 0.27 的特征

Fig. 6 Features with a correlation coefficient greater than 0.27 between yield strength and tensile strength

为了满足特征工程和机器学习建模的需求,对这些数据进行了格式和结构的分析。将数据整理成了适合建模的数据集,确保了数据的一致性和准确性。在数据集中,每个样本代表一种钛合金材料,特征参数包括合金的成分和热处理工艺参数,目标变量则包括该合金的力学性能指标,即屈服强度和抗拉强度。

利用机器学习方法,计算机可以从训练数据中学习,并建立起特征与标签之间的映射关系,进而构建模型。为了得到适合的机器学习算法,研究采用留一交叉验证法(LOO-CV)来评估和比较模型的预测准确性。将训练数据集分为两部分:一部分作为验证集的单个样本,另一部分作为训练组的 $N-1$ 个样本。主要步骤是训练 $N-1$ 个样本的模型,并使用训练好的模型对剩余单个样本进行预测。交叉验证过程重复 N 次,每个样本都会作为验证数据集仅使

对皮尔逊相关关系进行分析,发现元素的最小价电子数对屈服强度影响最大,影响系数为 -0.512 ,时效温度(0.432)、 V (0.394)、 Fe (0.365)、 Al (0.322)等对屈服强度的影响呈正相关, Nb (-0.328)、 Ta (-0.282)、固溶时间(-0.267)、轧制压下率(-0.235)对屈服强度的影响呈负相关,元素的最小价电子数对抗拉强度影响最大,影响系数为 -0.543 , Fe (0.416)、 Al (0.391)、 V (0.368)、时效温度(0.318)、 Cr (0.293)等对抗拉强度的影响呈正相关, Nb (-0.343)、固溶时间(-0.304)、 Ta (-0.271)、轧制压下率(-0.258)对抗拉强度的影响呈负相关。通过对相关系数的计算,以及对每种特征的相关系数绝对值进行排序,依据经验设定一个标准线 0.27,最终确定了以 V 合金成分为主要特征的 38 种特征参数作为合金材料抗拉强度性能预测模型建模的特征集合,如图 6(a)所示;以 Fe 合金成分为主要特征的 44 种特征参数作为合金材料抗拉强度性能预测模型建模的特征集合,如图 6(b)所示。

用一次。因此,留一交叉验证将得到 N 个结果,使用这 N 个结果的平均值来评估分类器的性能。

尽管深度学习算法在很多领域表现出色,但传统的机器学习算法(如随机森林、XGBoost、梯度提升回归等)仍然有其独特的优势和适用场景。深度学习算法通常需要大量的标注数据来进行有效的训练,同时也需要大量的计算资源(如 GPU)和较长的训练时间,而传统的机器学习算法在数据较少的情况下往往能表现得更好,在计算资源和时间有限的情况下更为高效。基于本研究所构建的数据库具有数据量小但维度较高的特点,选择构建四种传统机器学习模型,分别是随机森林、XGBoost、梯度提升以及使用线性回归作为元学习器,组合构建了“Superlearner”超级学习模型。为评价他们的性能,使用决定系数 R^2 (表示模型预测准确性的方差,越接近 1 越好),均方根误差 RMSE(表示模型预测错误

率, 越低越好)来评估模型的最终性能。最终模型训练完成结果如图 7 所示, $R^2=0.82$, $RMSE=0.0567$ 。

训练完成后的机器学习模块被集成到可视化平台上。为了更加全面的显示模型的性能, 在 R^2 和 $RMSE$ 基础上, 又增加了两个指标可解释方差得分 EVS 和平均绝对误差 MAE。通过雷达图基于四个指标可视化各种模型的性能, 具体效果如图 8(a) 所示。由于 EVS 和 MAE 的值越接近 0 表示模型越好, 为了保持一致性, 用 1 减去的结果作为最终精确度。从中心到四个顶点的投影轴代表从 0 到 1 的尺度。每个模型都是一个不规则的四边形, 用不同的颜色来反映模型的综合能力。完整的四边形表明模型在四个指标上的表现更全面。当鼠标悬停在四边形区域上时, 该区域就会相应地绘制。当鼠标移动到四边形的顶点时, 也会提示该点的值。该系统还提供了另一个列表视图, 如图 8(b), 来显示每个模型在四个评估指标上的具体值。列表视图中模型的颜色与雷达图中的颜色一致, 用户可以单击每个指标名称右侧的排序按钮对模型进行排序。从

这些视图中, 用户不仅可以直观地获得模型的整体性能和每个指标的单独性能, 还可以通过四边形的完整性来比较各种模型之间的性能并选择合适的模型。

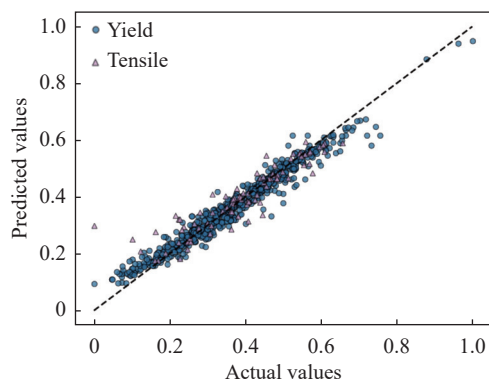


图 7 机器学习训练结果, 钛合金屈服强度与抗拉强度预测值和实际值的对比

Fig. 7 Comparison of predicted and actual values of yield strength and tensile strength of titanium alloys from machine learning training results



(a) 模型性能雷达图; (b) 模型关键参数列表视图

图 8 不同机器学习模型的性能比较

Fig. 8 Performance comparison of different machine learning models

3 试验评估

在本节中, 将提出一个探索案例, 展示该系统如何帮助用户交互式地考察钛合金合成的影响因素。一个典型的探索过程可以总结如下, 首先在控制面板中选择基本设置, 然后通过以下几个方面来分析特征: ①折线的陡度和波谷表现屈服强度和抗拉强度的范围, 其趋势对标签分类起决定性作用; ②聚类结果在空间上表示了不同钛合金之间的相似关系, 通过对相邻位置材料的特征分析, 能够为目标材料的性能提升提供一些思路; ③属性卡片上的柱状图和特征显示影响材料性能的几十种特征和两个重要属性的具体数值; ④模型准确度是用来衡量该系统实用性的重要指标, 所有模型的准确率范围都在

0.9 以上, 能够有效地预测目标材料的性能。

作者对 TC4 钛合金包含的成分、工艺范围进行了研究。TC4 是一种被广泛应用于航空航天、生物医学和高性能工程领域的钛合金牌号, 其卓越的强度、耐腐蚀性和生物相容性使其成为现代工业设计的关键材料。TC4 钛合金的标准成分和选定的计算成分如表 1 所示, 钛合金聚类结果如图 9 所示。

在对 TC4 分布区域探索的过程中, 发现图 9 是一个值得进一步研究的地方, 它包括 $Ti_{89.67}Al_{6.1}V_{4.05}Fe_{0.08}O_{0.1}$ 、 $Ti_{89.51}Al_{6.11}V_{4.15}Fe_{0.12}O_{0.11}$ 和 $Ti_{89.26}Al_{6.19}V_{4.24}Fe_{0.2}O_{0.11}$ 。这三种材料具有相似的空间位置, 有很大可能具有非常相似的特征和原始属性。系统预测 $Ti_{89.67}Al_{6.1}V_{4.05}Fe_{0.08}O_{0.1}$ 的屈服强度和抗拉强度分别为 833.247 MPa

和 875.325 MPa, 同时, $\text{Ti}_{89.51}\text{Al}_{6.11}\text{V}_{4.15}\text{Fe}_{0.12}\text{O}_{0.11}$ 的屈服强度和抗拉强度分别为 841.039 MPa 和 904.935 MPa, $\text{Ti}_{89.26}\text{Al}_{6.19}\text{V}_{4.24}\text{Fe}_{0.2}\text{O}_{0.11}$ 的屈服强度和抗拉强度分别为 956.364 MPa 和 1 024.94 MPa。作者不仅关注材料的两种力学强度, 通过对比属性卡片中这几种材料的其他特性, 观察特征柱状图的高度, 并结合皮尔逊相关系数, 推测出 Al、Fe、O、V 元素的比例对钛合金性能的影响较大。为了验证该猜测, 作者使用 Thermo Calc 软件进行了高通量热力学计算, 计算结果如下:

1) 成分含量对 TC4 中 α 相和 β 相体积分数的影响。 α 相体积分数随 V 和 Fe 元素含量的降低和 Al 元素含量的升高变大, 这是因为 V 和 Fe 元素是 β 相稳定元素, 而 Al 元素是 α 相稳定元素。出现反常的是, α 相的体积分数随着 α 相稳定元素 O 含量的升高而降低。这是因为 O 元素含量的升高提高了 V 元素在 β 相中的平衡溶解度, 而 V 元素对 β 相的稳定作用超过了 O 元素对 α 相的稳定作用。

2) 成分对 Al 元素和 O 元素在 α 相中含量的影响。成分对 Al 元素在 α 相中平衡溶解度的影响如图 10(a) 所示, 提高 V、Fe 和 O 元素的添加量, 能够提高 Al 元素在 α 相中的平衡浓度。成分对 O 元素

在 α 相中平衡溶解度的影响如图 10(b) 所示, 提高 V 和 Fe 元素的添加量, 降低 Al 元素的添加量, 能够提高 O 元素在 α 相中的平衡浓度。

表 1 TC4 钛合金的标准成分和计算选择的成分
Table 1 Standard composition and calculated selected composition of TC4 titanium alloy

Element	Ti	Al	V	Fe	O
Standard value	Bal.	5.5 ~ 6.75	3.5 ~ 4.5	0 ~ 0.3	0 ~ 0.21
Calculated value	Bal.	$\Delta=0.1$	$\Delta=0.1$	$\Delta=0.05$	$\Delta=0.03$

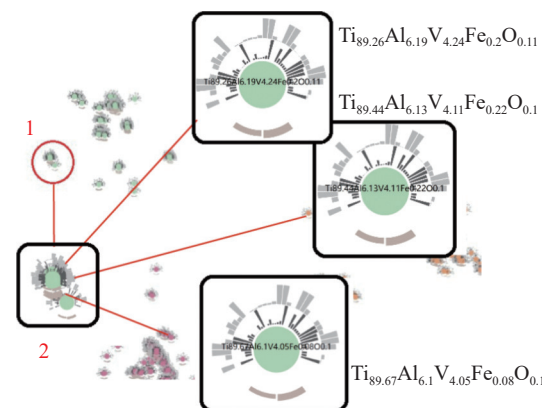


图 9 钛合金聚类结果与局部样本属性放大视图
Fig. 9 Clustering results and enlarged view of local titanium alloy samples

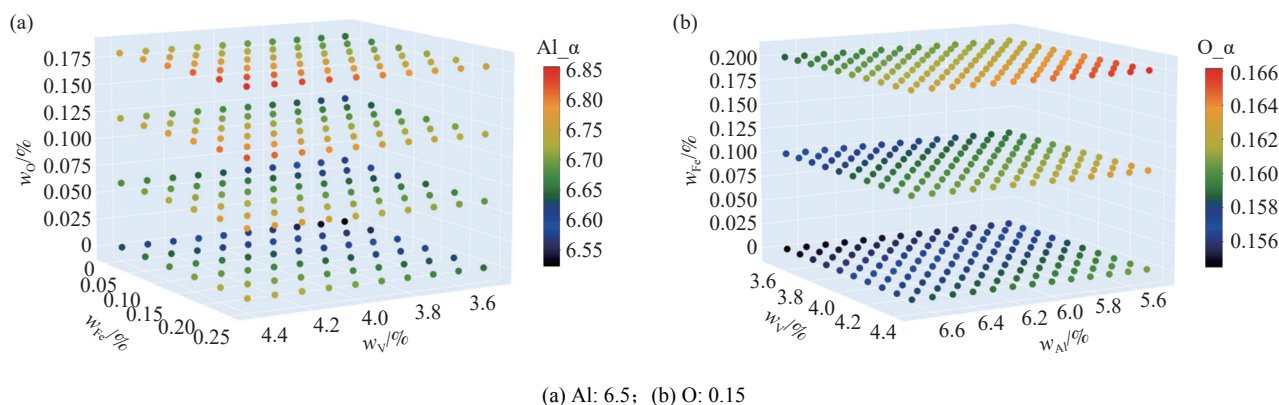


图 10 成分对 TC4 钛合金中相含量与 α 相中元素溶解度的影响
Fig. 10 Effect of composition on phase fractions and solubility in α phase of TC4 titanium alloy

3) 成分对 V 元素和 Fe 元素在 β 相中含量的影响。成分对 V 元素在 β 相中平衡溶解度的影响如图 11(a) 所示, 提高 Al 和 O 元素的添加量, 降低 Fe 元素的添加量, 能够提高 V 元素在 β 相中的平衡浓度。成分对 Fe 元素在 β 相中平衡溶解度的影响如图 11(b) 所示, 降低 Al、V 和 O 元素的添加量, 能够提高 V 元素在 β 相中的平衡浓度。

4) 成分对强度的影响。从图 12 中可以看出 TC4 钛合金的屈服强度随着四种合金元素添加量的增大而升高, 其中 Fe 和 O 元素的强化作用大于 Al 和 V 元素的作用。这是因为合金元素添加量的提

高, 显著增加了钛合金的固溶强化量。

通过对以上试验的计算结果进行试验, 最终结果验证了作者的猜测, 即通过协同提升 Fe、Al、V 的含量, 能够使材料的屈服强度和抗拉强度有明显的提高, 同时也证明了该系统基于钛合金关键参数预测力学性能的有效性。这个案例充分表明该可视化方法和系统在钛合金材料的探索中具有很强的现实意义, 基于机器学习预测结果的模型是有价值和可行的。另外, 根据本文的可视化分析, 协同优化固溶时间和温度也在很大程度上可能提高钛合金性能, 这为未来钛合金的工艺改造提供了新的方向。

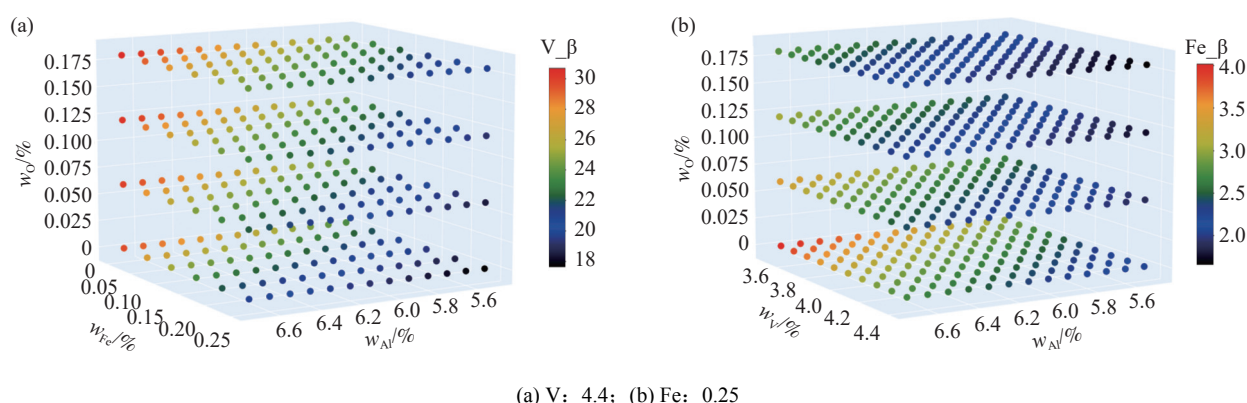
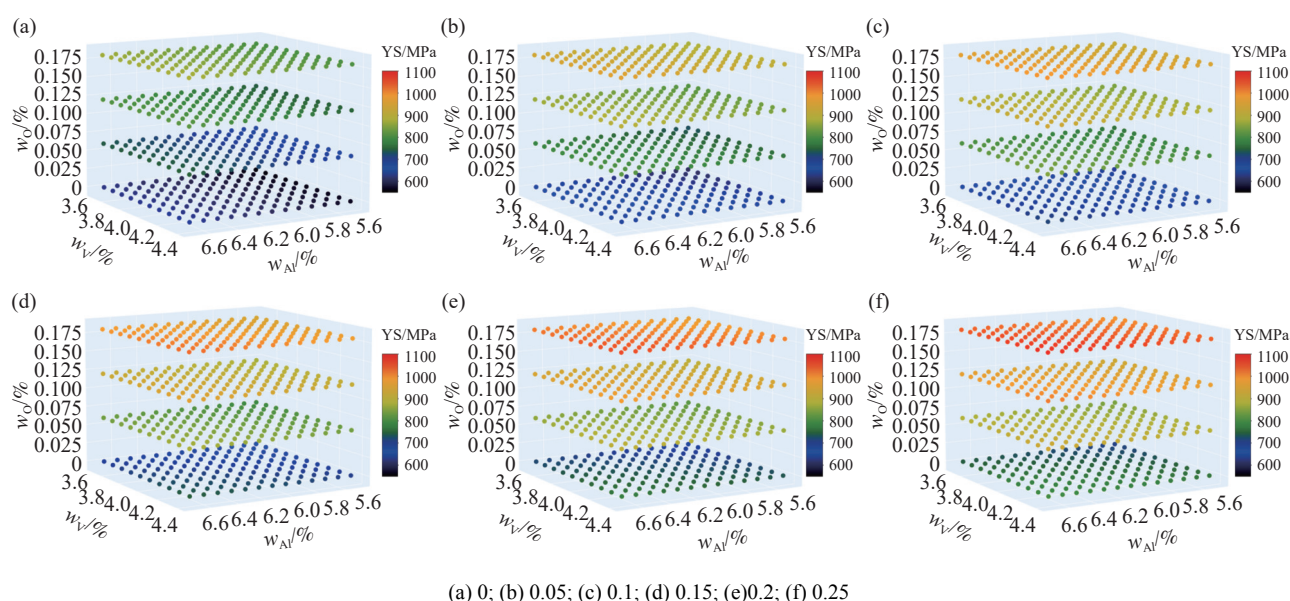
图 11 V 和 Fe 在 β 相中平衡溶解度的影响Fig. 11 Effect of composition on the equilibrium solubility of V and Fe in the β phase

图 12 不同 Fe 含量对 TC4 钛合金相组成的影响

Fig. 12 Effect of different Fe contents on the phase composition of TC4 titanium alloy

4 结论及改进方向

1) 协同运用机器学习模型与可视化分析方法, 成功揭示了钛合金成分-结构-性能关系, 为合金设计加速化提供了直观有效的分析工具和决策支持框架。

2) 建立了 TAExplorer 探索系统, 整合数据驱动建模与交互式可视化技术, 支持特征分布探索、相似性聚类、模型性能比较和试验验证等多功能模块, 具备向其他结构化材料任务扩展的能力。

3) 实际应用贡献: 通过试验验证, 成功筛选出多种满足设计要求的最优钛合金配方, 显著缩小了试验目标空间, 节省研究成本, 为钛合金设计与开发提供了高效可行的新路径。

4) 未来改进方向: 从传统相关性分析向因果性探索转变, 引入图神经网络等以因果关系为中心的算法, 结合密度泛函理论(DFT)和热力学计算模拟, 实现对钛合金性能形成机制的深层理解和更具解释力的预测模型。

参考文献

- [1] WILLIAMS J C, BOYER R R. Opportunities and issues in the application of titanium alloys for aerospace components[J]. Metals, 2020, 10(6): 705.
- [2] UHLMANN E, KERSTING R, KLEIN T B, *et al.* Additive manufacturing of titanium alloy for aircraft components[J]. Procedia Cirp, 2015, 35: 55-60.
- [3] WANG Z, YANG Q W, TANG C, *et al.* Optimization of acid leaching process for titanium slag after alkali leaching of scr

- catalyst[J]. Guangdong Chemical Industry, 2022(49): 1-2.
- [4] LIU X, CHU P K, DING C. Surface modification of titanium, titanium alloys, and related materials for biomedical applications[J]. Materials Science and Engineering: R: Reports, 2004, 47(3-4): 49-121.
- [5] ZHANG H, YAN N, LIANG H, *et al.* Phase transformation and microstructure control of Ti₂AlNb-based alloys: A review[J]. Journal of Materials Science & Technology, 2021, 80: 203-216.
- [6] CUI C, HU B M, ZHAO L, *et al.* Titanium alloy production technology, market prospects and industry development[J]. Materials & Design, 2011, 32(3): 1684-1691.
- [7] VEIGA C, DAVIM J P, LOUREIRO A J R. Properties and applications of titanium alloys: a brief review[J]. Rev. Adv. Mater. Sci, 2012, 32(2): 133-148.
- [8] KOSARAJU S, ANNE V G. Optimal machining conditions for turning Ti-6Al-4V using response surface methodology[J]. Advances in Manufacturing, 2013, 1(4): 329-339.
- [9] HASHMI K H, ZAKRIA G, RAZA M B, *et al.* Optimization of process parameters for high speed machining of Ti-6Al-4V using response surface methodology[J]. The International Journal of Advanced Manufacturing Technology, 2016, 85(5): 1847-1856.
- [10] SULAIMAN M A, CHE HARON C H, GHANI J A, *et al.* Optimization of turning parameters for titanium alloy Ti-6Al-4V ELI using the response surface method (RSM)[J]. Journal of Advanced Manufacturing Technology (JAMT), 2013, 7(2).
- [11] MIA M, KHAN M A, DHAR N R. High-pressure coolant on flank and rake surfaces of tool in turning of Ti-6Al-4V: investigations on surface roughness and tool wear[J]. The International Journal of Advanced Manufacturing Technology, 2017, 90(5): 1825-1834.
- [12] ALI KHAN M, JAFFERY S H I, KHAN M, *et al.* Statistical analysis of energy consumption, tool wear and surface roughness in machining of titanium alloy (Ti-6Al-4V) under dry, wet and cryogenic conditions[J]. Mechanical sciences, 2019, 10(2): 561-573.
- [13] GÜNAY M, KAÇAL A, TURGUT Y. Optimization of machining parameters in milling of Ti-6Al-4V alloy using Taguchi method[J]. Engineering Sciences, 2011, 6(1): 428-440.
- [14] NAM J, LEE S W. Machinability of titanium alloy (Ti-6Al-4V) in environmentally-friendly micro-drilling process with nanofluid minimum quantity lubrication using nanodiamond particles[J]. International Journal of Precision Engineering and Manufacturing-Green Technology, 2018, 5(1): 29-35.
- [15] ELTAGGAZ A, NOUZIL I, DEIAB I. Machining Ti-6Al-4V alloy using nano-cutting fluids: Investigation and analysis[J]. Journal of Manufacturing and Materials Processing, 2021, 5(2): 42.
- [16] 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.
- [17] 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.
- [18] OUTEIRO J, CHENG W, CHINESTA F, *et al.* Modelling and optimization of machining of Ti-6Al-4V titanium alloy using machine learning and design of experiments methods[J]. Journal of Manufacturing and Materials Processing, 2022, 6(3): 58.
- [19] LIU X, PENG Q, PAN S, *et al.* Machine learning assisted prediction of microstructures and Young's modulus of biomedical multi-component β -Ti alloys[J]. Metals, 2022, 12(5): 796.
- [20] CHAI C, WANG Y, ZHAO S, *et al.* Machine learning-assisted design of low elastic modulus β -type medical titanium alloys and experimental validation[J]. Computational Materials Science, 2024, 238: 112902.
- [21] PATURI U M R, PALAKURTHY S T, CHERUKU S, *et al.* Role of machine learning in additive manufacturing of titanium alloys—A review[J]. Archives of Computational Methods in Engineering, 2023, 30(8): 5053-5069.
- [22] ANGELINI M, SANTUCCI G, SCHUMANN H, *et al.* A review and characterization of progressive visual analytics[C]//Informatics. MDPI, 2018, 5(3): 31.
- [23] KAHNG M, ANDREWS P Y, KALRO A, *et al.* A cti v is: Visual exploration of industry-scale deep neural network models[J]. IEEE transactions on visualization and computer graphics, 2017, 24(1): 88-97.
- [24] LIU S, WANG X, LIU M, *et al.* Towards better analysis of machine learning models: A visual analytics perspective[J]. Visual Informatics, 2017, 1(1): 48-56.
- [25] LU J, CHEN W, MA Y, *et al.* Recent progress and trends in predictive visual analytics[J]. Frontiers of Computer Science, 2017, 11(2): 192-207.
- [26] LU Y, GARCIA R, HANSEN B, *et al.* The state - of - the - art in predictive visual analytics[C]//Computer Graphics Forum. 2017, 36(3): 539-562.
- [27] CHENG S, SHEN H, SHAN G, *et al.* Visual analysis of meteorological satellite data via model-agnostic meta-learning[J]. Journal of Visualization, 2021, 24(2): 301-315.
- [28] YUAN J, CHEN C, YANG W, *et al.* A survey of visual analytics techniques for machine learning[J]. Computational Visual Media, 2021, 7(1): 3-36.
- [29] SUN G D, WU Y C, LIANG R H, *et al.* A survey of visual analytics techniques and applications: State-of-the-art research and future challenges[J]. Journal of Computer Science and Technology, 2013, 28(5): 852-867.
- [30] ANDRIENKO N, ANDRIENKO G. Visual analytics of movement: An overview of methods, tools and procedures[J]. Information visualization, 2013, 12(1): 3-24.
- [31] PREIM B, LAWONN K. A survey of visual analytics for public health[C]//Computer Graphics Forum. 2020, 39(1): 543-580.