“基于机器学习的 Al-Zn-Mg-Cu 合金化学成分-多性能映射关系构建与验证”拓展补充材料

司悦琦[1,2] 郑 许[3] 霍宇彤[1,2] 马 凯[1,2] 马 会[1,2] 肖伯律[1,2] 陈星秋[1,2]

1 中国科学院金属研究所 沈阳材料科学国家实验室 沈阳 110016

2 中国科学技术大学 材料科学与工程学院 沈阳 110016

3 广西南南铝加工有限公司 广西铝合金材料与加工重点实验室 广西南南铝航空交通铝合金新材料与应用研究院 南宁 530031

Supplemental Materials for Machine Learning-Based Construction and Validation of Composition-Properties Mapping for Al-Zn-Mg-Cu Alloys

SI Yueqi[1,2], ZHENG Xu[3], HUO Yutong[1,2], MA KAI[1,2], MA Hui[1,2], XIAO Bolv[1,2], CHEN Xingqiu[1,2]

1 Shenyang National Laboratory for Materials Science, Institute of Metal Research, Chinese Academy of Sciences, Shenyang 110016, China

2 School of Materials Science and Engineering, University of Science and Technology of China, Shenyang 110016, China

3 ALG Aluminium Inc., Guangxi Key Laboratory of Materials and Processes of Aluminum Alloys, Guangxi ALG Research Institute of New Aluminum Alloy Materials and Applications for Aerospace Transportation, Nanning 530031, China

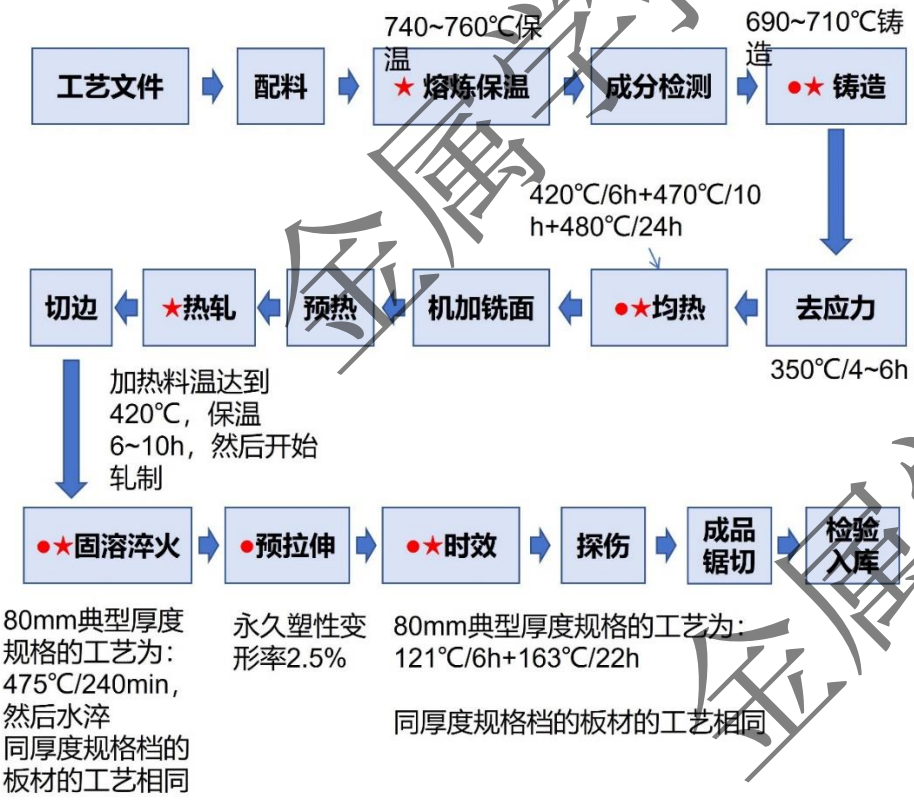


图 S1 7xxx 铝合金标准化生产流程

Fig. S1 Standard production process of 7xxx aluminum alloy

收稿日期 2026-06-16 **定稿日期** 2026-09-10

作者简介 司悦琦，女，2000 年生，博士生

通讯作者 马 会，hma@imr.ac.cn，主要从事结构合金服役性能的计算研究

陈星秋，xingqiu.chen@imr.ac.cn.，主要从事材料设计和计算研究

金属学报 金属学报 金属学报

表 S1 机器学习流程中各特征名的定义

Table S1 Feature definitions used in machine learning

序号	特征名	定义
1	Al(%)	铝元素质量分数(%)
2	Si(%)	硅元素质量分数(%)
3	Fe(%)	铁元素质量分数(%)
4	Cu(%)	铜元素质量分数(%)
5	Mn(%)	锰元素质量分数(%)
6	Mg(%)	镁元素质量分数(%)
7	Cr(%)	铬元素质量分数(%)
8	Ni(%)	镍元素质量分数(%)
9	Zn(%)	锌元素质量分数(%)
10	Ti(%)	钛元素质量分数(%)
11	Zr(%)	锆元素质量分数(%)
12	Ga(%)	镓元素质量分数(%)
13	V(%)	钒元素质量分数(%)
14	Be(%)	铍元素质量分数(%)
15	d1	电导率(S)测试试样厚度(mm)
16	h1	电导率(S)测试试样宽度(mm)
17	d2	断裂韧性(KIC)测试试样厚度(mm)
18	h2	断裂韧性(KIC)测试试样宽度(mm)
19	d3	力学性能测试试样厚度(mm)
20	h3	力学性能测试试样宽度(mm)
21	direction_d	direction 为 d 时取 1，否则 0
22	direction_L-T	direction 为 L-T 时取 1，否则 0
23	direction_S-L	direction 为 S-L 时取 1，否则 0
24	direction_T-L	direction 为 T-L 时取 1，否则 0
25	Direction_d	Direction 为 d 时取 1，否则 0
26	Direction_H	Direction 为 H 时取 1，否则 0
27	Direction_Z	Direction 为 Z 时取 1，否则 0
28	s_thickness_code	电导率试样厚度 d1 所属厚度区间的标签编码
29	kic_thickness_code	断裂韧性试样厚度 d2 所属厚度区间的标签编码
30	mechanical_thickness_code	力学试样厚度 d3 所属厚度区间的标签编码
31	atomic_number_mean	原子序数加权均值
32	pauling_electronegativity_mean	Pauling 电负性加权均值
33	mulliken_electronegativity_mean	Mulliken 电负性加权均值
34	group_mean	族数加权均值
35	period_mean	周期数加权均值
36	first_ionization_energy_mean	第一电离能加权均值
37	second_ionization_energy_mean	第二电离能加权均值
38	third_ionization_energy_mean	第三电离能加权均值
39	mendeleev_number_mean	门捷列夫数加权均值
40	atomic_radius_mean	原子半径加权均值

金属学报

41	melting_point_mean	熔点加权均值
42	boiling_point_mean	沸点加权均值
43	density_mean	密度加权均值
44	electron_affinity_mean	电子亲和能加权均值
45	valence_electrons_mean	价电子数加权均值
46	Young_mean	杨氏模量加权均值
47	Bulk modulus_mean	体积模量加权均值
48	Mineral hardness_mean	矿物硬度加权均值
49	lattice_constant_a_mean	晶格常数 a 加权均值
50	lattice_constant_b_mean	晶格常数 b 加权均值
51	lattice_constant_c_mean	晶格常数 c 加权均值
52	electron_distance_mean	电子离核平均距离加权均值
53	resistivity_coefficient_mean	电阻率系数加权均值
54	diffusion_coefficient_in_Al_mean	元素在 Al 中扩散系数加权均值
55	atomic_number_var	原子序数加权方差
56	pauling_electronegativity_var	Pauling 电负性加权方差
57	mulliken_electronegativity_var	Mulliken 电负性加权方差
58	group_var	族数加权方差
59	period_var	周期数加权方差
60	first_ionization_energy_var	第一电离能加权方差
61	second_ionization_energy_var	第二电离能加权方差
62	third_ionization_energy_var	第三电离能加权方差
63	mendeleev_number_var	门捷列夫数加权方差
64	atomic_radius_var	原子半径加权方差
65	melting_point_var	熔点加权方差
66	boiling_point_var	沸点加权方差
67	density_var	密度加权方差
68	electron_affinity_var	电子亲和能加权方差
69	valence_electrons_var	价电子数加权方差
70	Young_var	杨氏模量加权方差
71	Bulk modulus_var	体积模量加权方差
72	Mineral hardness_var	矿物硬度加权方差
73	lattice_constant_a_var	晶格常数 a 加权方差
74	lattice_constant_b_var	晶格常数 b 加权方差
75	lattice_constant_c_var	晶格常数 c 加权方差
76	electron_distance_var	电子离核平均距离加权方差
77	resistivity_coefficient_var	电阻率系数加权方差
78	diffusion_coefficient_in_Al_var	元素在 Al 中扩散系数加权方差

金属学报