

基于 BP 神经网络的 TC6 钛合金富氧 α 层厚度与热暴露温度、时间关系预报

罗连波, 朱景川, 刘 勇, 陈志旋

(哈尔滨工业大学 金属精密热加工国家级重点实验室, 黑龙江 哈尔滨 150001)

摘要: 将 TC6 钛合金经过不同热暴露工艺处理后, 测得其富氧 α 层的厚度。利用 BP 人工神经网络建立富氧 α 层的厚度与热暴露工艺(热暴露温度、保温时间)之间的关系网络模型。结果表明: 所建的模型可以很好的预报不同热暴露工艺下富氧 α 层厚度, 而且还可以通过富氧 α 层厚度得到最优的热暴露工艺。建立了富氧 α 层厚度为 50 μm 热暴露工艺临界图以便指导生产实践。

关键词: TC6 钛合金; 富氧 α 层; BP 人工神经网络

中图分类号: TG146.2⁺3

文献标识码: A

文章编号: 1002-185X(2014)04-0946-05

与钢铁或铝合金相比, 钛合金是一种更新的结构材料。钛合金具有比强度高、耐腐蚀性好、耐高温等优点。从 20 世纪 50 年代开始, 钛合金在航空航天领域中得到了迅速的发展^[1]。由于钛及其合金化学活性高, 在热成形或热处理加热过程中, 空气中的氧会扩散进入基体形成富氧 α 层^[2]。富氧 α 相是一种危害性极大的脆性相, 硬度高、塑性低, 使钛合金在继续变形或受力时导致表面开裂, 塑性降低, 导致钛合金的性能下降^[3]。

人工神经网络(Artificial Neural Network, ANN)是近年来发展起来的通过模拟脑神经对外部环境进行学习过程建立起来的一种人工智能模式识别方法, 为解决线性系统和模型未知的预测与控制提供了新的途径^[4]。在钛合金研究中, 人工神经网络也有广泛的应用: 西北大学的沈昌武等利用神经网络建立起了 TA15 钛合金的本构关系^[5], 哈工大的徐文臣等利用神经网络预测了 BT20 钛合金的流变应力^[6], S. Malinovd 等人则利用神经网络建立起了不同钛合金的工艺、性能之间的关系^[7,8]。而在研究钛合金富氧 α 层生成与热暴露温度、保温时间之间的关系鲜有报道。

本工作基于研究 TC6 钛合金经过不同热暴露工艺(热暴露温度、保温时间)处理, 测得其生成的富氧 α 层的厚度, 利用 BP 人工神经网络建立起它们之间的关系模型, 预测试验工艺以外的富氧 α 层生成情况, 以期更有效地指导生产实践。

1 网络模型的建立

1.1 样本数据的获取

本试验所采用的原材料是 TC6 钛合金(Ti-6Al-2.5Mo-1.5Cr-0.5Fe)。其化学成分见表 1。从铸锭上取 $\Phi 10 \text{ mm} \times 8 \text{ mm}$ 的圆柱, 再将其用钼丝线切割为 4 等份, 用 187 μm 砂纸将表面进行打磨, 使表面光滑, 便于热暴露处理。

TC6 钛合金是一种两相钛合金, 其原始试样的微观组织如图 1 所示。图中白色的是 α 相, 深色的是 β 转变组织。从图中可以看出 α 相是呈等轴状的。

当钛合金在热处理或热加工时, 空气中的氧就会向钛合金中扩散。由于氧元素是 α 相稳定元素, 它会溶于 α -Ti 基体中而形成间隙固溶体, 从而在钛合金的表层形成一层富氧 α 相。表层富氧 α 层由变粗变长的 α 相和 β 相组成。图 2 为 TC6 钛合金 825 $^{\circ}\text{C}$ 热暴露 120 min 的微观组织形貌。从图 2 中可以看出, 试样从表面到心部分别是富氧 α 相(箭头所示), 过渡区和基体组织, 富氧 α 层和基体组织在金相照片上表现出衬度上的明显不同, 据此可以从金相组织照片上测量出富氧 α 层的厚度(约定从表层到过渡区结束, 接近基体组织都是富氧 α 层的厚度。表层有很薄一层的 TiO_2 氧化皮很容易

表 1 TC6 钛合金化学成分

Table 1 Chemical composition of the TC6 alloy ($\omega/\%$)

Al	Mo	Cr	Fe	Si	Ti
6.26	2.727	1.50	0.48	0.28	Bal.

收稿日期: 2013-04-11

作者简介: 罗连波, 男, 1988 年生, 硕士生, 哈尔滨工业大学材料科学与工程学院, 黑龙江 哈尔滨 150001, 电话: 0451-86413792, E-mail: luolianbo2008@sina.com

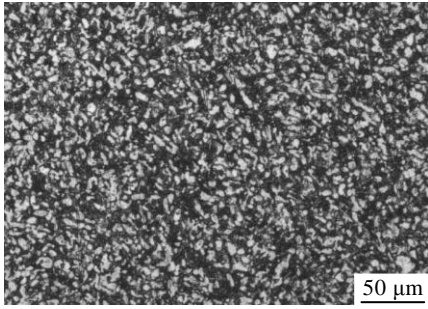


图 1 TC6 钛合金原始试样的微观组织

Fig.1 Microstructure of the received TC6 alloy

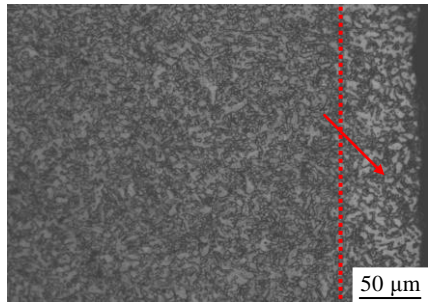


图 2 TC6 钛合金 825 °C 热暴露 120 min 微观组织

Fig.2 Microstructure of TC6 alloy with holding at 120 min for 825 °C

剥落, 在实际测量过程中对富氧 α 层的厚度影响不大)。

将所有的试样经过热暴露处理后, 空冷, 制备金相试样, 在蔡司光学显微镜下测量出各种热暴露工艺下的钛合金生成富氧 α 层的厚度, 用作样本数据(如表 2 所示)。

1.2 BP 神经网络的学习过程

BP 神经网络的学习过程由信息的正向传递和误差的反向传播组成。以二层 BP 网络为例: 设输入为 P_j , 输入层有 r 个神经元, 隐含层有 S_1 个神经元, 激活函数为 $f1$, 输出层 S_2 个神经元, 对应激活函数为 $f2$, 输出为 a , 目标矢量为 t 。

(1) 信息的正向传递:

a) 隐含层第 i 个神经元的输出:

$$a1_i = f1\left(\sum_{j=1}^r w1_{ij} P_j + b1_j\right) \quad i = 1, 2, 3 \dots S1 \quad (1)$$

b) 输出层第 k 个神经元的输出为:

$$a2_k = f2\left(\sum_{i=1}^{S1} w2_{ki} a1_i + b2_k\right) \quad k = 1, 2, 3 \dots S2 \quad (2)$$

c) 误差函数为:

$$E(w, B) = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{S2} (t_k - a2_k)^2 \quad (3)$$

表 2 各种热暴露处理下测得富氧 α 层厚度

Table 2 Thickness of oxygen-enriched α layer measured under different thermal exposure processing

Thermal exposure temperature/°C	Holding time/min	Thickness/μm
750	60	8
750	90	10
750	120	11
750	150	15
750*	180	20
750	240	23
775	45	11
775	60	17
775	90	21
775	120	22
775*	150	31
775	180	38
775	240	42
800	30	10
800	45	18
800	60	26
800*	90	38
800	120	42
800	150	50
800	180	55
800	240	60
825	15	20
825	30	29
825*	45	38
825	60	55
825	90	60
825	120	66
825	150	78
825	180	81
825	240	102
850*	5	11
850	15	21
850	30	39
850	45	56
850	60	66
850	90	80
850	120	88
850	150	92
850	180	100
850*	240	120
900	5	20
900	15	30
900	30	60
900	45	71
900*	60	86
900	90	100
900	120	140
900	150	170
900	180	195
900*	240	210
950	5	25
950	15	50
950	30	73
950	45	89
950*	60	100
950	90	118
950	120	151
950	150	190
950*	180	220
950	240	250

(2) 用梯度下降法求权值变化及误差的反向传播:

a) 输出层的权值变化:

对从第 i 个输入到第 k 个输出的权值变化:

$$\Delta w_{2_{ki}} = -\eta \frac{\partial E}{\partial w_{2_{ki}}} = -\eta \frac{\partial E}{\partial a_{2_k}} \cdot \frac{\partial a_{2_k}}{\partial w_{2_{ki}}} = \eta \delta_{ki} a_{1_i} \quad (4)$$

其中, $\delta_{ki} = e_k f' 2'$, $e_k = t_k - a_{2_k}$

同理可得偏差变化为:

$$\Delta b_{2_{ki}} = -\eta \frac{\partial E}{\partial b_{2_{ki}}} = -\eta \frac{\partial E}{\partial w_{2_k}} \cdot \frac{\partial a_{2_k}}{\partial b_{2_{ki}}} = \eta \delta_{ki} \quad (5)$$

b) 隐含层的权值变化

$$\Delta w_{1_{ki}} = -\eta \frac{\partial E}{\partial a_{2_k}} \cdot \frac{\partial a_{2_k}}{\partial a_{1_i}} \cdot \frac{\partial a_{1_i}}{\partial w_{1_{ki}}} = \eta \delta_{ki} P_j \quad (6)$$

其中, $\delta_{ij} = e_i f' 1'$, $e_i = \sum_{k=1}^{S_2} \delta_{ki} w_{2_{ki}}$

同理可得偏差变化:

$$\Delta b_{1_{ij}} = \eta \delta_{ij} \quad (7)$$

网络训练时, 通过误差反向传播和权值 w_{kj} 的修正, 最后使系统误差 E 达到最小。此时, 记录所得权值 w_{kj} , 即可进行预测。

1.3 工艺-富氧 α 层厚度网络模型的建立

选取表 2 中的 50 组数据(未标有*的数据)作为训练样本, 随机选取的任意 10 组(标*的数据)用作预测。样本数据的归一化方法^[9]如下:

$$X'_i = \frac{X_i - X_{\min}}{X_{\max} - X_{\min}} * 0.8 + 0.1 \quad (8)$$

其中, X_i 代表样本数据, X_{\max} 为样本数据中的最大值, X_{\min} 则为最小值。在网络输出结果时进行反归一化:

$$Y'_i = (Y_i - 0.1) * 1.25 * (X_{\max} - X_{\min}) + X_{\min} \quad (9)$$

其中, Y_i 则代表网络输出。

本研究在通过试错法^[10]来确定网络的隐含层数、隐含层神经元数、学习率、目标误差值等。经过反复调整和训练得到了较好的工艺-富氧 α 层厚度网络, 结构如图 3 所示, 具体说明如下: 以工艺参数作为网络的输入, 富氧 α 层厚度参数作为输出, 一个隐含层, 神经元数为 4, 建立 $2 \times 4 \times 1$ 的网络, 训练函数为 `trainscg`, 目标误差值设为 0.001, 学习率为 0.2。

2 网络预测结果及分析

图 4 是网络输出与试验结果的对比。折线代表的是实际的结果, 柱状图则表示对误差绝对值。可以看出, 网络的输出结果与试验值之间有着很好的拟合性, 二者的变化趋势基本一致; 网络的厚度输出与试验结果之间的相对误差基本上在 20% 以下, 这充分说明了网络的准确性(前 50 组数据为网络训练输出的对比结果, 后 10 组为预测输出的结果)。

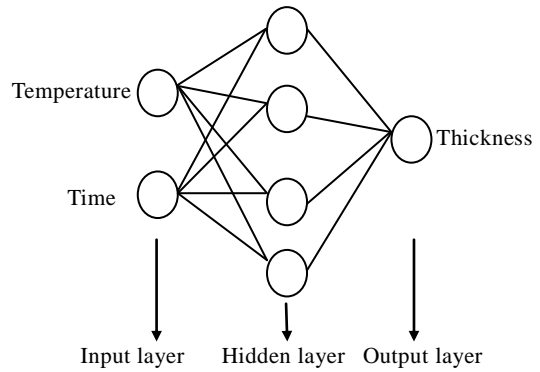


图 3 网络结构

Fig.3 Structures of the networks

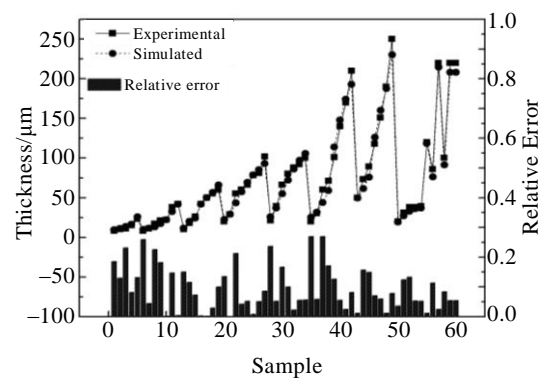


图 4 网络输出结果与试验结果的对比

Fig.4 Comparison of the results of network and experiments

3 网络应用

3.1 网络正向预测

网络建立以后, 输入一个样本数据值范围内的任何数据至网络中便可以得到相应的输出。以下是利用网络得出的 TC6 钛合金富氧 α 厚度与热暴露温度、保温时间之间的关系图(如图 5 所示)。

利用已经建立的网络, 固定热暴露温度(例如 $725\text{ }^\circ\text{C}$), 预测富氧 α 层厚度随热暴露保温时间的变化, 如图 6a 所示, 富氧 α 层厚度与热暴露保温时间之间呈现很好的抛物线关系, 这与实验研究的结果相一致。当热暴露保温时间确定(例如 120 min), 预测富氧 α 层厚度随热暴露温度的变化, 如图 6b 所示, 从结果中可见在热暴露温度低于 $800\text{ }^\circ\text{C}$ 时, 随热暴露温度增加, 富氧 α 层厚度缓慢增加, 800 、 $900\text{ }^\circ\text{C}$ 左右变化比较大, $850\text{ }^\circ\text{C}$ 出现比较缓慢的增长趋势。在 $925\text{ }^\circ\text{C}$ 出现了富氧 α 层厚度的最大值。

在上述预测基础上, 在 $925\text{ }^\circ\text{C}$, 120 min 热暴露处理一组试样, 和之前得到的 $900\text{ }^\circ\text{C}$, 120 min 和 $950\text{ }^\circ\text{C}$, 120 min 的结果进行对比, 满足上述规律。通

过

测

很难固溶到 β 相中，从而抑制了氧原子进一步向基体内扩散，在 925 °C 左右达到平衡，富氧 α 层厚度也到达极值。

3.2 粒子群反向预测及工业生产应用

试验中选取富氧 α 层厚度分别为 80、100 μm ，通过计算给出的 2 个工艺分别是 814 °C，225 min 和 842 °C，118 min。在这 2 个工艺下，处理试样，通过测量富氧 α 层的厚度分别是 77、102 μm ，这和通过网络模型预测的厚度相对误差分别为 3.9% 和 2%，进一步说明了所建模型的准确性。

由于在实际生产过程中，零件热处理后还要进行机加工等后续处理，加工深度一般为 0.03~0.05 mm。而当富氧 α 层厚度小于 20 μm 时对性能影响较小，可以允许存在。所以，零件的富氧 α 层厚度要在 50 μm 以内。

利用所建立的网络模型，控制临界富氧 α 层厚度为 50 μm ，反向预测出所对应的各种热暴露处理工艺(如图 7 所示)。曲线左下方区域的热暴露工艺，所得到的富氧 α 层厚度在 50 μm 下，而右上方区域的热暴露工艺得到的富氧 α 层厚度在 50 μm 以上。利用图 7 便可以简单控制在生产过程中富氧 α 层厚度以及热暴露工艺，进而优化生产流程，可以避免由于工艺不当所带来的零件失效。

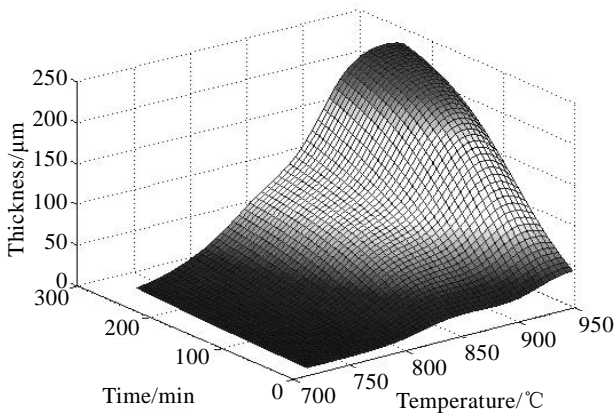


图 5 TC6 钛合金富氧 α 厚度与热暴露温度、保温时间之间的三维关系图

Fig.5 Three dimensional diagram of thickness of oxygen-enriched α layer in TC6 under different thermal exposure processing

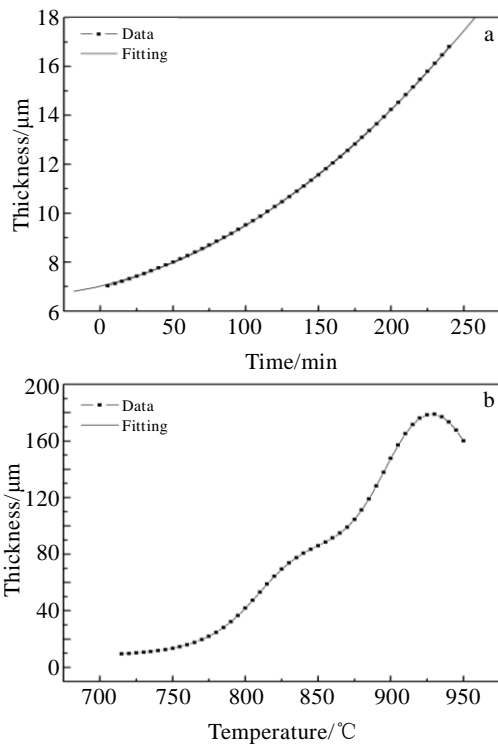


图 6 网络预测结果

Fig.6 Result of network prediction: (a) change of thickness with holding time at 725 °C and (b) change of thickness with exposure temperature in 120 min

量，925 °C，120 min 热暴露处理富氧 α 层厚度为 172 μm ，而预测为 178 μm ，结果在误差范围内。这可能是由于随着温度升高，氧原子向钛合金基体扩散，固溶到 α 相中，同时，基体中的 β 相组织增加，氧原子

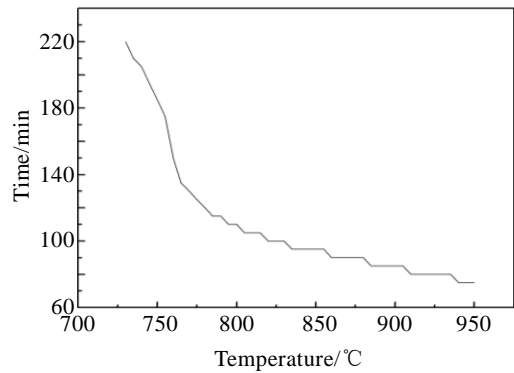


图 7 富氧 α 层厚度为 50 μm 的热暴露工艺临界线
Fig.7 Critical line of thermal exposure processing when the thickness is 50 μm

4 结 论

1) 以热暴露温度，保温时间作为输入，富氧 α 厚度作为输出，建立起了结构为 $2 \times 4 \times 1$ 的 TC6 钛合金富氧 α 厚度的预测模型，实现了对不同热暴露温度、不同保温时间下富氧 α 层的厚度的预测，并且建立了富氧 α 厚度与热暴露温度、保温时间三者之间关系的三维曲面图。

2) 利用建立的网络结合粒子群反向优化, 给出富氧 α 厚度的反推出其最佳的热暴露温度、保温时间; 进一步建立了富氧 α 层厚度为 50 μm 的热暴露工艺临界曲线图, 以便指导生产实践。

参考文献 References

- [1] Fu Yanyan(付艳艳), Song Yueqing(宋月清), Hui Songxiao(惠松骁) *et al.* *Chinese Journal of Rare Metals*(稀有金属)[J], 2006, 30(6): 850
- [2] Krupa D, Baszkiewicz J, Kozubowski J *et al.* *Surface and Coatings Technology*[J], 1997, 96: 223
- [3] Song M H, Han S M, Min D J *et al.* *Scripta Materialia*[J], 2008, 59: 623
- [4] Zhu Zhishou(朱知寿). *Rare Metals Letters*(稀有金属快报)[J], 2007, 26(12): 24
- [5] Shen Changwu(沈昌武), Yang He(杨合), Sun Zhichao(孙志超) *et al.* *Journal Plasticity Engineering*(塑性工程学报)[J], 2007, 14(4): 101
- [6] Xu Wenchen(徐文臣), Shan Debin(单德彬), Lü Yan(吕炎). *Ordnance Material Science and Engineering*(兵器材料科学与工程)[J], 2007, 30(3): 33
- [7] Malinov S, Sha W. *Materials Science and Engineering*[J], 2004: 365: 202
- [8] Malinov S, Sha W, McKeown J J. *Computational Materials Science*[J], 2001, 21: 375
- [9] He Yong(何勇), Zhang Honggang(张红钢), Liu Xuefeng(刘雪峰) *et al.* *Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J], 2008, 37(1): 19
- [10] Xu L J, Davim J P, Cardoso R. *Journal of Materials Processing Technology*[J], 2007, 189(1-3): 374

Relationship Prediction between the Thickness of Oxygen-enriched α Layer, Thermal Exposure Temperature and Holding Time for TC6 Titanium Alloy Based on BP Neural Network

Luo Lianbo, Zhu Jingchuan, Liu Yong, Chen Zhixuan

(The National Key Laboratory for Precision Hot Forming of Metals, Harbin Institute of Technology, Harbin 150001, China)

Abstract: A series of thickness of oxygen-enriched α layer were obtained after TC6 titanium alloy were treated with different thermal exposure processing (thermal exposure temperature, holding time). Their relationship network model was built by BP artificial neural network. The results show that the built model can be used for the prediction of the thickness of oxygen-enriched α layer of TC6 titanium alloy under different thermal exposure treatments. Meanwhile, the model can also serve as a guide for the heat treatment of TC6 titanium alloy if the thickness is given.

Key words: TC6 titanium alloy; oxygen-enriched α layer; BP artificial neural network

Corresponding author: Luo Lianbo, Candidate for Master, School of Material Science and Engineering, Harbin Institute of Technology, Harbin 150001, P. R. China, Tel: 0086-451-86413792, E-mail: luolianbo2008@sina.com