

基于 BP 网络 Ti-6Al-3Nb-2Zr-1Mo 合金等温压缩流变应力预测

陈海生^{1,2}, 冯 勇^{1,2}, 马凡蛟^{1,2}, 毛友川², 刘向宏^{1,2}, 张平祥^{1,2},
寇宏超¹, 傅恒志¹

(1. 西北工业大学 凝固技术国家重点实验室, 陕西 西安 710072)
(2. 西部超导材料科技股份有限公司, 陕西 西安 710018)

摘 要: 通过对 Ti-6Al-3Nb-2Zr-1Mo 合金 820~970 °C, 0.001~1 s⁻¹ 条件下的热模拟压缩试验, 得到不同变形条件下的高温变形真应力-真应变曲线。基于此实验数据建立了该合金 BP-ANN 本构预测模型和传统的回归模型。结果表明: 2 个模型的最大相对误差分别为 4.35% 和 13.9%, 平均绝对误差 AARE 分别为 1.42% 和 6.53%, 说明 BP-ANN 模型具有较优异的预测能力, 此模型可作为 Ti-6Al-3Nb-2Zr-1Mo 钛合金高温变形本构模型。

关键词: Ti-6Al-3Nb-2Zr-1Mo 钛合金; 热变形; BP-ANN; 本构方程

中图分类号: TG146.2³

文献标识码: A

文章编号: 1002-185X(2016)06-1549-05

钛合金以其密度小、比强度高、耐腐蚀性好和生物相容等诸多优点, 在航空航天、石油化工和生物医学等领域得到了越来越广泛的应用^[1], 作为关键结构材料, 钛合金研究逐渐向高强度、高韧性的方向发展, Ti-6Al-3Nb-2Zr-1Mo 钛合金是一种具有高强、高韧、耐蚀及可焊等良好综合性能的近 α 型钛合金, 主要用于制造耐压壳体等结构件^[2,3]。

钛合金对热变形工艺参数如应变、温度和应变速率具有较高的敏感性, 通常用本构方程表示流变应力与热加工工艺参数之间的函数关系, 进而揭示钛合金热变形行为并优化材料热成形工艺。但是, 流变应力与工艺参数之间具有十分复杂的非线性关系, 很难用一个回归数学模型准确表示, 且每个材料参数都要用通过不同相区的数据反复求解, 十分复杂。然而, 相比回归法, ANN (神经网络) 方法除了具有较强的非线性问题处理能力外, 其还具有自组织、自修正、内插、外插和预测能力。其通过大量训练数据的计算优化强度因子, 建立输入数据与输出数据之间较高鲁棒性的映射关系^[4,5]。鉴于 ANN 出色地处理非线性问题的能力, 近几年已被广泛应用于多种合金本构关系的预测。Quan 等^[6] 在等温热模拟压缩试验 ($T=923\sim 1173$ K, $\dot{\epsilon}=0.01\sim 10$ s⁻¹, $\epsilon=60\%$) 基础上借助于 BP 神经网络 (BP-ANN) 建立了 Ti-13Nb-13Zr

生物钛合金流变应力预测模型, 通过误差分析证明了预测精度, 并将此模型作为材料本构关系写入有限元仿真软件 Marc, 等温热模拟压缩仿真分析得出的载荷-位移与实验曲线对比显示了较高的预测精度。Lin 等^[7] 对 42CrMo 合金流变应力数据构建神经网络预测模型, 并得到了较高的预测精度。在钛合金方面, L. Cheng^[8], 安震等^[9], N. Kotkunde^[10], G. Srinivasu 等^[11], Y. Sun 等^[12] 分别基于 BP 神经网络建立了 Ti-45Al-8Nb, Ti-555211, Ti-6Al-4V, Ti-10V-4.5Fe-3Al, Ti-47Al-2Nb-2Cr 等钛合金流变应力预测模型, 均证明了 BP 神经网络是一种十分有效且精度较高的流变应力预测模型建模方法。随着舰船工业的发展, Ti-6Al-3Nb-2Zr-1Mo 合金应用越来越受到人们的重视, 但对 Ti-6Al-3Nb-2Zr-1Mo 高温钛合金应用此方法建立本构模型还鲜有报道。因此本研究以 Gleeble-3800 等温热模拟压缩实验获得的流变应力数据为基础, 建立预测 Ti-6Al-3Nb-2Zr-1Mo 合金高温流变应力预测 BP-ANN 模型。

1 实 验

试验用料为西部超导材料科技股份有限公司生产的 Ti-6Al-3Nb-2Zr-1Mo 合金锻板, 金相法测得其相变点为 995 °C。其原始组织如图 1 所示, 为显著的双态

收稿日期: 2015-11-30

基金项目: 国家国际科技合作专项 (2013DFB50180); 陕西省科技统筹创新工程计划项目 (2015KTTSG01-08)

作者简介: 陈海生, 男, 1980 年生, 博士生, 西北工业大学材料学院, 陕西 西安 710072, 电话: 029-86514523, E-mail: chenhs15@163.com

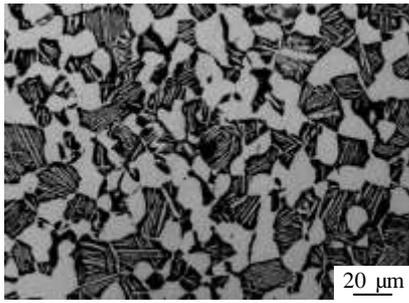


图 1 Ti-6Al-3Nb-2Zr-1Mo 合金的原始组织

Fig.1 Initial microstructure of Ti-6Al-3Nb-2Zr-1Mo alloy

组织。等温热压缩试样加工成 $\Phi 8 \times 12$ mm 的圆柱形，两端和外圆预打磨以消除宏观缺陷。热模拟压缩实验在 Gleeble-3800 上进行，热压缩试验分别在温度为 820, 880, 940 和 970 °C；应变速率为 0.001, 0.01, 0.1 和 1 s⁻¹ 条件下进行，保温时间为 5 min，变形量 60%。压缩完成的试样进行水淬处理以保留高温变形组织，应力应变曲线会自动被采集。不同应变温度、应变速率和应变条件下的流变应力数据如表 1 所示。

2 BP-ANN 本构模型建立

一个典型的 BP-ANN 一般由 3 部分组成：输入层、隐含层和输出层，如图 2 所示。为了避免网络训练及检验时带来的数据不稳定，通常对输入层数据进行归一化处理，本研究按公式 (1) 对数据进行归一化。

$$X' = \frac{X - 0.95X_{\min}}{1.05X_{\max} - 0.95X_{\min}} \quad (1)$$

式中， X' 为归一化的数据， X 为原始数据， X_{\max} 和 X_{\min} 分别为原始数据的最大和最小值。BP-ANN 通过不断调整权值实现信号误差在允许范围内，进而停止训练。

本研究的训练数据：应变为 0.1~0.4 和 0.6~0.8 不同温度和应变速率下的应变应力。通过公式 (2) 确定隐含层的神经元个数为 12。

$$n_1 = \sqrt{n+m} + a \quad (2)$$

其中， n_1 为隐含层单元数； n 为输入层神经元数； m 为输出层神经元数； a 的取值范围为 [1 10]。

输入层、隐含层和输出层之间的传递函数分别为 tansig 和 logsig，训练函数运用 trainlm，目标误差设定为 10⁻⁴。这里采用相关系数 R 和平均绝对相对误差 AARE 衡量基于应变补偿本构方程的预测精度， R 和 AARE 的表达式为：

$$R = \frac{\sum_{i=1}^N (E_i - \bar{E})(P_i - \bar{P})}{\sqrt{\sum_{i=1}^N (E_i - \bar{E})^2 \sum_{i=1}^N (P_i - \bar{P})^2}} \quad (3)$$

表 1 不同应变温度、应变速率和应变条件下 Ti-6Al-3Nb-2Zr-1Mo 合金的流变应力值

Table 1 Flow stress values of Ti-6Al-3Nb-2Zr-1Mo alloy at different deformation temperatures, strain rates and strains

Strain	Strain rate/s ⁻¹	Deformation temperature/°C			
		820	880	940	970
0.1	0.001	168.1	100.7	33	21.9
	0.01	264.5	163.8	60.2	41
	0.1	349.1	237.2	102	62.5
	1	390.8	282.9	139.2	80.5
0.2	0.001	137.8	84.5	29.5	19.8
	0.01	238.4	141.5	56.9	38.6
	0.1	339.2	205.7	97.5	61.5
	1	389.6	276	141.5	82.6
0.3	0.001	117.4	72.3	26.7	18.3
	0.01	213.1	123.4	53.7	35.8
	0.1	310.7	181.4	92.6	60.1
	1	370.8	262	140.5	81.4
0.4	0.001	102.7	62.5	23.8	16.6
	0.01	188.5	109.2	50	33.7
	0.1	282.1	158.3	89	58.3
	1	341.2	246.6	140	78.3
0.5	0.001	91.3	55.2	21.8	15.2
	0.01	166.2	98	46.5	31
	0.1	253.8	141	83.6	57.3
	1	319.5	236	140	74.6
0.6	0.001	82.4	49.5	20.5	14.3
	0.01	147.5	88.9	43	29.3
	0.1	234.4	128.3	80	56.9
	1	301.6	228.5	139	71.4
0.7	0.001	76.1	44.9	19.6	13.7
	0.01	130.8	80.4	40.7	28.7
	0.1	213.2	121.6	77	57.1
	1	291.7	225.8	138.6	69.8
0.8	0.001	71.9	42.7	19.7	13.9
	0.01	107.4	75	39	29.1
	0.1	192.1	117	75	58.2
	1	287.7	224	139.5	68.1

$$AARE = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left| \frac{E_i - P_i}{E_i} \right| \times 100\% \quad (4)$$

式中， E 为流变应力的实验值， P 为模型预测值， N 为数据组数量。

3 结果与讨论

3.1 基于传统回归法的本构方程

变形温度为 820 °C，应变速率为 0.001~1 s⁻¹ 和应变速率为 0.01 s⁻¹，变形温度为 820~970 °C 的流变应力曲线如图 3 所示。从图中可以看出，流变应力随着温度升高和应变速率降低而降低。随着应变增加，在

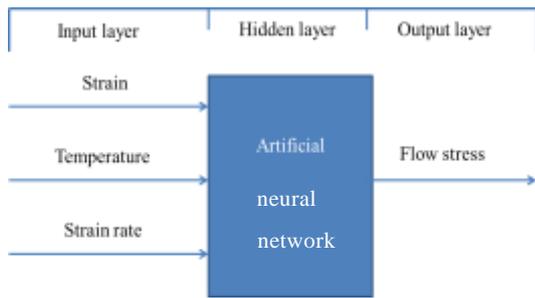


图 2 神经网络结构示意图

Fig.2 Artificial neural network structure schematic

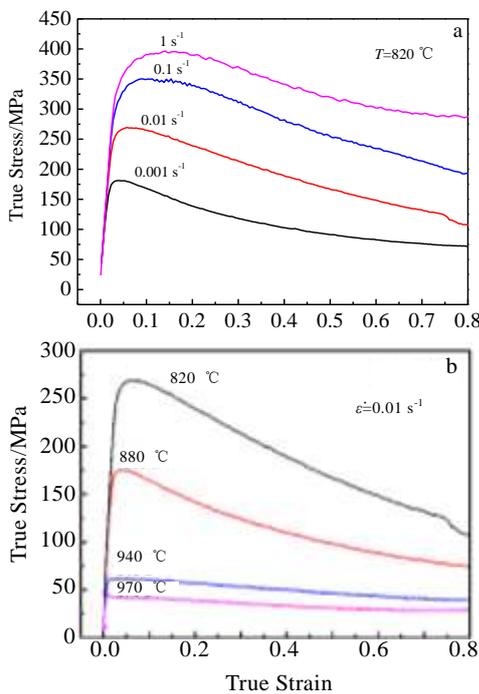


图 3 变形温度 820 °C 和应变速率为 0.01 s⁻¹ 时流变应力曲线

Fig.3 Typical flow stress curves of Ti-6Al-3Nb-2Zr-1Mo alloy at temperature of 820 °C (a) and strain rates of 0.01 s⁻¹(b)

较小应变时流变应力达到峰值，而后流变应力随着应变递增减小并逐渐趋于稳定，具有显著的流动软化现象。相关研究^[13]表明，流动软化一般是动态球化、动态再结晶或者局部塑性流动引起。表明 Ti-6Al-3Nb-2Zr-1Mo 合金对变形温度和应变速率具有很高的敏感性。

金属高温变形本构关系通常用 Arrhenius 方程表示^[14]：

$$\dot{\epsilon} = A\sigma^n \exp\left(-\frac{Q}{RT}\right) \quad (5)$$

式中， A 是恒定应变条件下的材料常数， n 为应力指数， Q 为表面激活能， R 为气体常数。

这里将应变为 0.5 时，各变形温度、应变速率及相应流变应力利用多元线性回归的方法得到 A 、 n 及 Q 的值分别为： $e^{31.39}$ 、4.49 和 536.67 kJ/mol，如图 4 所示，进而得到 Ti-6Al-3Nb-2Zr-1Mo 合金的本构方程为：

$$\dot{\epsilon} = e^{31.39} \sigma^{4.49} \exp\left(-\frac{536.67}{RT}\right) \quad (6)$$

然而，这种方式不能同时表征两相区和单相区，也不能准确得出其他应变条件下的流变应力，因为材料常数得出是基于该应变条件的数据。基于此，根据 BP 网络优势的阐述，运用 BP 网络训练的黑箱强大的非线性处理能力及鲁棒性特征，则可以解决此问题。

3.2 BP-ANN 预测流变应力

将变形温度、应变速率及应变根据公式 (1) 进行归一化处理作为 BP-ANN 的输入，将相应条件下流变应力作为网络输出，其中应变为 0.1~0.4 和 0.6~0.8 条件的数据作为训练样本，应变为 0.5 的数据为检验样本。图 5 为回归模型、BP-ANN 模型与实验数据的对比。从图中可以看出，BP-ANN 模型较回归模型具有更高的预测精度，其预测数据与实验值很接近。2 种模型预测相对误差如图 6 所示，从图中可以看出，

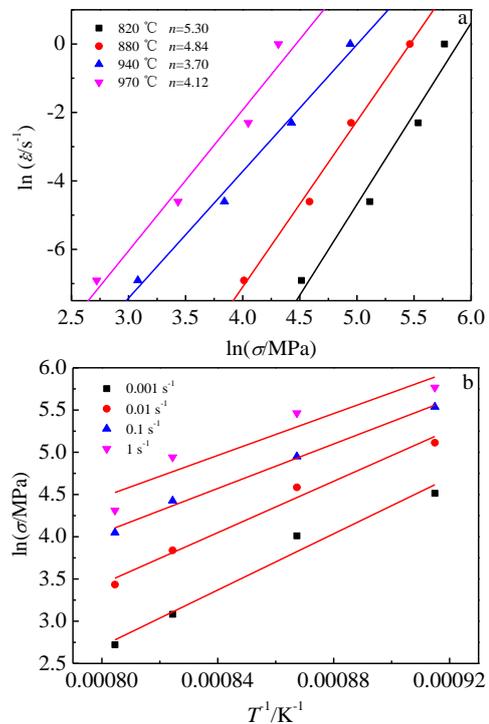


图 4 Ti-6Al-3Nb-2Zr-1Mo 合金 $\ln \dot{\epsilon} - \ln \sigma$ 和 $\ln \sigma - 1/T$ 之间关系

Fig.4 Relationship of $\ln \dot{\epsilon} - \ln \sigma$ (a) and $\ln \sigma - 1/T$ (b) for Ti-6Al-3Nb-2Zr-1Mo alloy

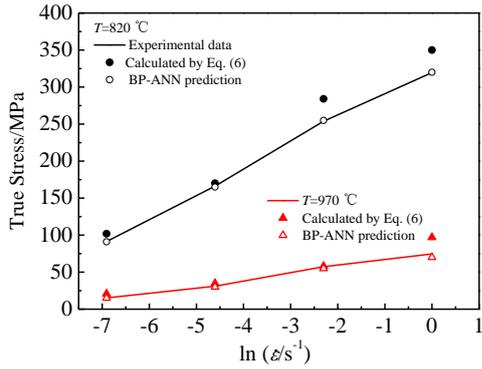


图 5 当应变为 0.5 时, ANN 预测值与方程得到值的对比图
Fig.5 Flow stress comparison of the values predicted by ANN model and calculated by Eq. (6) ($\epsilon=0.5$) with experimental value

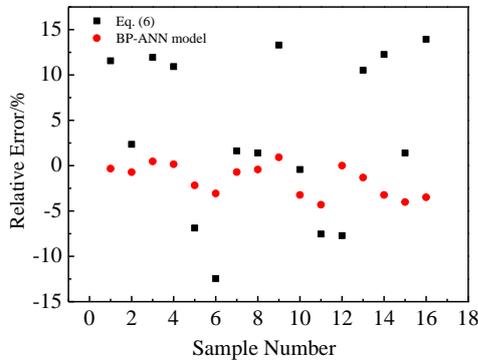


图 6 基于回归方程和 BP-ANN 模型预测相对误差

Fig.6 Relative error of predicted flow stress of BP-ANN model and Eq. (6)

BP-ANN 模型的预测相对误差范围在 $-1.1\% \sim 4.35\%$, 而基于回归方程 (6) 预测相对误差在 $-3.2\% \sim 13.9\%$ 。进而显示了 BP-ANN 模型优越的预测能力。

鉴于神经网络 (ANN) 处理复杂非线性问题的能力, Carlos 等^[15]借助于 ANN 预测了临界转变温度并验证了其具有很高的预测精度; Ji 等^[16]基于等温热压缩实验数据预测了 Aermet100 钢高温变形行为, 并证明了所建网络具有优良的泛化能力。模型为了进一步验证 BP-ANN 模型预测该 Ti-6Al-3Nb-2Zr-1Mo 合金流变应力精度, 作者通过拟合 2 种模型预测值与实验值的相关系数 (R) 和平均绝对误差 (AARE) 进行检验, 如图 7 所示。从图中可以明显看出, BP-ANN 和回归方法预测的相关系数 R 分别为 0.992 和 0.991, 两者相差不多。但是, 平均绝对误差 AARE 分别为 1.42% 和 6.53%, 进而证明了此 BP-ANN 模型预测值与实测值吻合良好, 能够准确反映 Ti-6Al-3Nb-2Zr-1Mo 合金高温变形过程的实际。

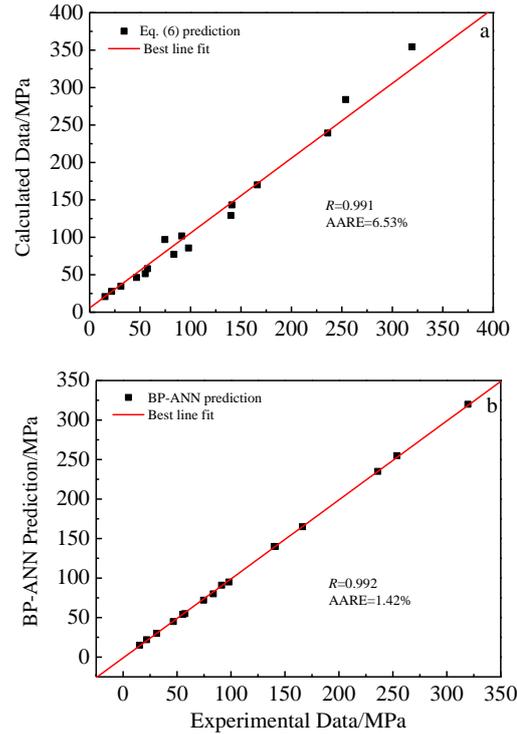


图 7 应变为 0.5, 不同应变速率和变形温度条件下, 方程 (6)、BP-ANN 预测值与实验值对比

Fig.7 Comparison between the values predicted at a strain of 0.5 by Eq. (6) (a) and BP-ANN (b) with experimental flow stress through all different deformation temperatures and strain rates

4 结 论

1) 基于不同热变形条件 ($T: 820, 880, 940, 970^\circ\text{C}$; $\dot{\epsilon}: 0.001, 0.01, 0.1, 1 \text{ s}^{-1}$) 下的流变应力数据, 建立了 Ti-6Al-3Nb-2Zr-1Mo 合金 BP-ANN 本构预测模型和传统的回归模型, 最大相对误差分别为 4.35% 和 13.9%, 平均绝对误差 AARE 分别为 1.42% 和 6.53%。

2) 预测结果对比显示, BP-ANN 法预测精度优于传统数学模型。其可用于预测 Ti-6Al-3Nb-2Zr-1Mo 合金高温变形力学行为。

参考文献 References

[1] Luo Guozhen(罗国珍), Zhou Lian(周 廉), Deng Ju(邓 炬). *Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J], 1997, 26(5): 1
[2] Chen Jun(陈 军), Zhao Yongqing(赵永庆), Chang Hui(常 辉). *Materials Review* (材料导报)[J], 2005(6): 67
[3] Li Liang(李 梁), Song Dejun(宋德军). *The Chinese Journal of Nonferrous Metals* (中国有色金属学报)[J], 2010, 20: 738

- [4] Guo Z, Malinov S, Sha W. *Computational Materials Science*[J] 2005, 32: 1
- [5] Reddy N S, Lee C S, Semiatin J H *et al. Materials Science and Engineering: A*[J], 2006, 434(1-2): 218
- [6] Quan Guozheng, Pu Shiao, Zhan Zongyang *et al. International Journal of Precision Engineering and Manufacturing*[J], 2015, 16(10): 2129
- [7] Lin Y C, Fang X L, Wang Y P. *Journal of Materials Science*[J], 2008, 43: 5508
- [8] Cheng L, Chang H, Tang B *et al. Advanced Materials Research*[J], 2012, 510: 723
- [9] An Zhen(安震), Li Jinshan(李金山), Feng Yong(冯勇) *et al. Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J], 2015, 44(1): 0062
- [10] Kotkunde N, Deole A D, Gupta A K *et al. Materials & Design*[J], 2014, 55: 999
- [11] Srinivasu G, Rao R N, Nandy T K *et al. Procedia Engineering*[J], 2012, 38: 3709
- [12] Sun Y, Hu L, Ren J. *Journal of Materials Engineering and Performance*[J], 2015, 24(3): 1313
- [13] Zhou Jun(周军), Zeng Weidong(曾卫东), Shu Ying(舒滢) *et al. Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J], 2006, 35(2): 26
- [14] Jonas J J. *Acta Metallurgica*[J], 1969, 17: 397
- [15] Carlos G M, Carlos C, Francisca G C *et al. Journal of Materials Science*[J], 2007, 42: 5391
- [16] Ji G L, Li F G, Li Q H *et al. Computational Materials Science*[J], 2010, 48: 626

Isothermal Compression Flow Stress Prediction of Ti-6Al-3Nb-2Zr-1Mo Alloy Based on BP-ANN

Chen Haisheng^{1,2}, Feng Yong^{1,2}, Ma Fanjiao^{1,2}, Mao Youchuan², Liu Xianghong^{1,2}, Zhang Pingxiang^{1,2}, Kou Hongchao¹, Fu Hengzhi¹

(1. State Key Laboratory of Solidification Processing, Northwestern Polytechnical University, Xi'an 710072, China)

(2. Western Superconducting Technologies Co., Ltd, Xi'an 710018, China)

Abstract: Elevated-temperature flow behavior of Ti-6Al-3Nb-2Zr-1Mo titanium alloy was investigated by isothermal hot compression tests at strain rate from 0.001 to 1 s⁻¹ and in the temperature range of 820~970 °C on Gleeble-3800 simulator. The BP-ANN and regression models were established based on the experimental flow stress. Results show that the absolute value of maximum relative error obtained from the ANN model and the regression method are 4.35% and 13.9%, respectively. The average absolute relative errors are 1.42% and 6.53% corresponding to the ANN model and the regression method, respectively, which demonstrates that BP-ANN has a better prediction precision, and it can be used as the constitutive model of Ti-6Al-3Nb-2Zr-1Mo titanium alloy.

Key words: Ti-6Al-3Nb-2Zr-1Mo titanium alloy; hot deformation; BP-ANN; constitutive model

Corresponding author: Chen Haisheng, Candidate for Ph. D., School of Materials Science and Engineering, Northwestern Polytechnical University, Xi'an 710072, P. R. China, Tel: 0086-29-86514523, E-mail: chenhsh15@163.com