基于人工神经网络的超细晶纯钛热变形本构模型

刘晓燕^{1,2},杨 成¹,杨西荣^{1,2},强 萌¹,张欠欠¹

(1. 西安建筑科技大学,陕西 西安 710055)(2. 陕西省冶金工程技术研究中心,陕西 西安 710055)

摘 要: 对等通道转角挤压(ECAP)制备的超细晶纯钛,在温度为 250~450 ℃、应变速率为 10⁻⁵~1 s⁻¹的条件下进行热 压缩试验。基于真应力和真应变实验数据,分别使用人工神经网络(ANN)和 Arrhenius 方程建立超细晶纯钛的热变形 本构模型,研究其热变形行为。实验结果表明:在变形初期,流变应力随应变的增大而升高,随后趋于平缓,最终达 到一个稳定值。人工神经网络训练和预测结果表明:人工神经网络最佳结构为 3×12×1,人工神经网络模型预测的平 均相对误差(AARE)为 2.1%,相关系数(*R*)为 0.9979; Arrhenius 方程模型预测的 AARE 为 11.54%, *R* 为 0.9464。 即人工神经网络模型能够更加精确地描述超细晶纯钛的本构关系。通过对比不同温度下两种模型的误差,发现人工神 经网络模型在高温条件下具有更好的稳定性。

关键词: 超细晶纯钛; 人工神经网络; Arrhenius 本构方程; 流变应力

中图法分类号: TG146.23 文献标识码: A 文章编号: 1002-185X(2018)10-3038-07

钛及钛合金是近年来材料领域研究的热点。由于 其具有低密度,耐腐蚀,力学性能优异等特点而被广 泛地应用于航空、航天、医疗、汽车等领域。与粗晶 纯钛相比,ECAP 变形制备的超细晶纯钛具有更高的 屈服强度^[1]、更优异的蠕变性能^[2]以及疲劳性能^[3],因 而可以进一步扩展其应用前景。目前其加工和应用还 处于研究阶段。材料的高温流变特性和其本构关系是 研究材料热加工工艺的基础^[4]。因此,建立准确的本 构模型来描述超细晶纯钛在热压缩过程中的本构关系 显得极为重要。

金属材料的热压缩变形过程伴随着材料的回复和 再结晶过程,并且材料变形行为对应变速率,应变和 变形温度非常敏感^[5,6],所以很难建立一个准确的数学 模型来表达热变形过程中应力与应变速率、温度三者 之间的关系。目前,多数学者采用 Arrhenius 本构方程 来描述热压缩变形时的真应力-真应变之间的关系。 Li^[7]使用 Arrhenius 本构方程预测了 V-5Cr-5Ti 合金热 压缩过程的流变应力,结果显示其相对误差为 5.44%。 同样,Chen^[8]用同样的方法预测 2Zn-2.4Mg-1.2Cu 的 流变应力,相对误差达到 6.66%。这表明 Arrhenius 本 构方程可以较精确地描述材料的流变应力本构关系, 但是研究应变量对流变应力的影响时,进行进一步数 值拟合的计算工作量较大,并且预测误差也较大。

随着计算机技术在材料科学中的应用,世界各国 材料学者已经将人工神经网络应用于材料流变行为研 究与预测,它可以模拟人类大脑对信息进行自组织, 自学习和自适应^[9,10]。刘海定^[6]使用人工神经网络建立 了镁合金的本构模型,实验与预测值的平均相对误差 为 3.4%。Zhu^[5]使用人工神经网络对 TC21 合金的热压 缩变形行为进行建模,实验条件为应变速率范围 0.01~ 10 s⁻¹,温度范围 1000~1150 ℃,结果表明,人工神经 网络模型的平均相对误差为 1.54%。Liu^[11]采用人工神 经网络对 ZnCu2Al10 合金高温下的变形行为进行建 模,结果表明,采用四层网络结构时模型精确度最高, 平均误差仅为 2.01%。安迪,韩茂盛^[12,13]等人采用同 样的方法对镁合金,铜合金高温流变行为进行建模, 模型平均误差均在1%左右。这些结果说明人工神经网 络建立的材料流变应力本构模型可以得到非常高的预 测精度。但是,鲜有采用人工神经网络方法来研究超 细晶材料热变形行为的相关报道。基于此,本研究利 用超细晶纯钛热压缩实验所得数据,分别使用人工神 经网络和 Arrhenius 本构方程对超细晶纯钛的本构关 系进行建模,通过对比得出一种更为精确的模型来描 述超细晶纯钛的本构关系,为研究超细晶纯钛的热加

收稿日期: 2017-10-19

基金项目:国家自然科学基金(51474170);陕西省自然科学基金(2016JQ5026)

作者简介: 刘晓燕, 女, 1980 年生, 博士, 副教授, 西安建筑科技大学冶金工程学院, 陕西 西安 710055, 电话: 029-82202923, E-mail: xauat-lxyan@hotmail.com

工工艺提供重要的理论依据。

1 实 验

实验用纯钛的化学成分见表 1。采用 90°模具在室 温下对纯钛进行 4 道次 ECAP 变形,制得平均晶粒尺 寸约为 170 nm 的超细晶纯钛。将超细晶纯钛样品用线 切割机进行加工并用砂纸打磨,最终制成 Φ6 mm×9 mm 的棒状热压缩试样。采用 Gleeble-3500 热模拟试 验机对试样进行热压缩试验,试验温度为 250、350、 400 和 450 ℃,应变速率为 1、10⁻²、10⁻⁴ 和 10⁻⁵ s⁻¹。 为了便于研究超细晶纯钛应变速率敏感性,本实验采 取了变速率的实验方法。

2 超细晶纯钛的热变形行为

超细晶纯钛在 400 ℃、不同应变速率下的真应力-真应变曲线如图 1 所示。由于采用了变速率的实验方 法,故曲线存在上凸或下凹,但对于真应力-应变曲线 没有本质影响。由图 1 可知,在热变形开始阶段,超 细晶纯钛流变应力随应变的增加而迅速增加,产生急 剧加工硬化,随后增加幅度减小,最终达到稳态变形阶 段。这是因为在变形初期,内部位错密度不断上升, 造成位错缠结,使位错阻力增加,表现为急剧加工硬 化。随着应变增加,材料进入稳态流变阶段,此阶段虽 然产生大量位错,但由于大角度晶界对位错的吸收或湮 灭作用使得晶粒内部的位错密度减小,大角度晶界处



图 1 *T*=400 ℃时不同应变速率下超细晶纯钛的真应力-真应变曲线

Fig.1 True stress-true strain curves of UFG pure Ti at different strain rates (T=400 °C)

减小,材料发生软化。超细晶材料中大角度晶界的影 响较大,这与粗晶材料有明显不同。

图 2 为应变速率为 10⁻⁴ s⁻¹时在不同变形温度下超 细晶纯钛的真应力-真应变曲线。在同一应变速率下, 流变应力随温度的升高而降低。这是因为随温度的升 高滑移系的临界切应力减小,同时原子间结合力降低, 再结晶使材料晶粒均匀化、等轴化,这些均导致了流 变应力的降低。

3 人工神经网络模型的建立

关于人工神经网络的原理、设计、应用等细节在 文献[14-16]中给出了详细的介绍,其网络结构如图 3 所示。

3.1 人工神经网络结构的确定

本文采用 BP(back propagation)人工神经网络, 使用 MATLAB 软件建立人工神经网络模型,输入层有 3 个节点,分别为应变、应变速率和变形温度。输出 层有 1 个节点,为流变应力。中间隐层数目的选择是 人工神经网络的关键,一般情况下,增加隐含层数目 可以提高网络精度,但是过多的隐含层数目会使网络更 加复杂,导致训练过程中容易出现过度拟合的现象^[17]。



- 图 2 *ἐ*=10⁻⁴ s⁻¹时不同温度下超细晶纯钛的真应力-真应变曲线
- Fig.2 True stress-true strain curves of UFG pure Ti at different temperatures ($\dot{\varepsilon} = 10^{-4} \text{ s}^{-1}$)



图 3 人工神经网络的结构示意图

Fig.3 Schematic illustration of artificial neural network

本文选用单隐层的网络结构,采用试探法^[18]寻找其最 佳单元数。经过多次尝试,最终选择中间隐层单元数 为12,即建立的网络结构为3×12×1。

3.2 样本数据及预处理

在选择训练数据时,在不同温度,不同应变速率 的真应力-真应变曲线上选取 375 个数据点建立网络。 为了便于训练,取点时避免选取上凸或下凹段的数据 点,从中随机选取 300 个数据点用于网络训练,剩余 数据点用于网络测试。根据网络对输入和输出数据的 要求,若大小相差悬殊的数据同时作用网络的输入节 点,势必会湮没小数据对函数的作用,造成隐含层到 输入层之间权值调节上的困难,从而影响网络的收敛 速度和精度。为了克服这一缺点,必须先对输入数据 进行归一化处理,同时对输出数据进行反归一化处理, 使其输入值在[-1,1]之间^[19]。输入和输出数据按照如 下公式进行归一和反归一化处理:

 $x_{n} = (x - x_{\min})/(x_{\max} - x_{\min})$ (1)

$$x = x_{\min} + x_n (x_{\max} - x_{\min})$$
(2)

式中: *x* 为流变应力, *x*_{min} 为流变应力最小值, *x*_{max} 为 流变应力最大值, *x*_n 为归一化后的流变应力。

在训练过程中,初始权值在[-1,1]随机产生。经 过多次反复训练发现输入函数与传递函数选择双曲函 数 tansig,输出函数选择 purelin,训练函数取 traingdm, 学习速率取 0.5,动量因子为 0.8 时网络可以精确预测。

4 Arrhenius 本构模型的建立

流变应力,应变速率和温度三者的关系可用 Sellaer^[20]提出的包含形变激活能*Q*的双曲正弦函数来 表示:

$$\dot{\varepsilon} = AF(\sigma)\exp(-Q/RT) \tag{3}$$

 $F(\sigma)$ 为应力的函数, $F(\sigma)$ 在不同的条件下有 3 种不同的形式:

$F(\sigma) = \sigma^{n_1}$	$\sigma \alpha < 0.8$	(4)
----------------------------	-----------------------	-----

$$F(\sigma) = \exp(\beta\sigma) \quad \sigma\alpha > 1.2$$
 (5)

$$F(\sigma) = [\sinh(\alpha\sigma)]^n$$
所有 σ (6)

式中: σ为真应力, β为材料常数, α的值为β/n₁, R 是 气体常数, A 是与温度无关的常数。将式(4)~(6) 代入式(3)并对两边取对数得:

 $\ln \dot{\varepsilon} = \ln A_1 + n_1 \ln \sigma \tag{7}$

$$\ln \dot{\varepsilon} = \ln A_2 + \beta \sigma \tag{8}$$

$$\ln \dot{\varepsilon} = \ln A + n \ln[\sin h(\alpha \sigma)] - Q/RT$$
(9)

由式(7)、(8)式可知,当应变一定时,将应变 速率和不同温度下应力值代入式中,用最小二乘法对 $\ln \dot{\epsilon} 与 \ln \sigma 和 \ln \dot{\epsilon} 与 \sigma$ 的关系进行曲线拟合,如图 4 所 示,对直线斜率的倒数取平均值可得 n_1 , $\beta 风 \alpha$ 的值。



图 4 ε =0.1 时 ln σ 与 ln $\dot{\varepsilon}$ 和 σ 与 ln $\dot{\varepsilon}$ 的关系曲线 Fig.4 ln σ vs ln $\dot{\varepsilon}$ curves (a) and σ vs ln $\dot{\varepsilon}$ curves (b) (ε =0.1)

由式(9)可知,当温度一定时,同样采用最小二 乘法对 ln *έ* 和 ln[sinh(ασ)]的关系进行曲线拟合,对斜 率取平均值可得 *n*。当应变速率恒定时,对 1/*T* 和 ln[sinh(ασ)]的关系进行拟合,其斜率值为 *Q*/*Rn*,由此 可求得热激活能 *Q*,如图 5。

Zener 的研究表明,在材料的热变形过程中,材料的变形受热激活的控制,应变速率与温度的关系可用 Z 参数来表示:

 $Z = \dot{\varepsilon} \exp(Q/RT) = A[\sinh(\alpha\sigma)]^n$ (10)

对式(10)两边取对数可得:

$$\ln Z = \ln A + n \ln[\sinh(\alpha \sigma)]$$
(11)

由式(11)可知,作 ln[sinh(ασ)]与 lnZ的关系曲线并 用最小二乘法进行拟合,直线截距为 lnA,由此可求 得 A,如图 6。

表 2 给出了在不同应变条件下材料的参数值,所 有参数求得后即可得材料的本构方程。

5 结果与分析

在人工神经网络模型中,输入为应变速率、应变 和变形温度,输出为流变应力。连接输入和输出之间 的部分为隐含层。通过不断调整各层节点的权值,模 拟出热压缩过程中应变速率、应变和变形温度三者与



图 5 $\varepsilon=0.1$ 时 ln[sinh($\alpha\sigma$)]和 ln $\dot{\varepsilon}$ 以及 ln[sinh($\alpha\sigma$)]和 1/T 的关系曲线

Fig.5 $\ln[\sinh(\alpha\sigma)]$ vs $\ln\dot{\varepsilon}$ curves (a) and $\ln[\sinh(\alpha\sigma)]$ vs 1/Tcurves (b) ($\varepsilon=0.1$)



图 6 *ε*=0.1 时 lnZ 和 ln[sinh(*α*σ)]的关系曲线 Fig.6 $\ln Z \text{ vs } \ln[\sinh(\alpha\sigma)] \text{ curve } (\varepsilon=0.1)$

流变应力之间的关系。在使用神经网络模型进行预测 时,采用恒定速率。在误差计算时,将恒速率阶段的 真实流变应力与预测结果进行对比,所以此方法对误 差没有影响。人工神经网络对流变应力的模拟结果与 实验值的对比如图 7 所示。

由图 7 可知,人工神经网络的预测值与实验值相 差较小,总体平均相对误差(AARE)为2.1%,相关

	表 2	不同应变条件下材料参数值				
Table 2 Material parameters under different strain conditions						
З	β	п	α	$Q/J \cdot mol^{-1}$	Α	
0.10	0.056 868	11.857 0	0.003 525	169.1452	25.182	
0.15	0.064 445	15.608 3	0.002 956	161.9279	25.969	
0.20	0.065 020	14.209 7	0.003 370	201.4557	31.670	
0.25	0.078 287	19.012 9	0.003 068	213.5106	34.752	
0.30	0.087 871	19.154 8	0.003 045	202.1748	35.597	
0.35	0.088 596	21.745 4	0.003 036	252.4259	43.032	
0.40	0.107 089	29.421 2	0.002 938	341.5661	61.036	
0.45	0.139 469	36.044 5	0.002 892	409.3735	75.068	
0.50	0.151 762	39.855 6	0.002 849	447.3729	83.147	
0.55	0.136 675	35.759 6	0.002 854	410.1803	75.801	
0.60	0.111 821	28.752 1	0.002 887	333.9077	61.215	

系数(R)为 0.9979,最小 AARE 达到 0.01%。通过 对不同应变速率的人工神经网络输出值分别统计发 现, 当应变速率分别为 1, 10⁻², 10⁻⁴, 10⁻⁵ s⁻¹ 时, 其 AARE 分别为 0.02%, 0.02%, 0.13%, 5.7%。随着应 变速率的减小,误差逐渐增大,特别是在慢应变速率 10⁻⁵ s⁻¹的情况下误差较大。Tao^[21]在关于 TC4 压缩过 程的神经网络建模过程中也得到了类似的结果。

图 8 为 Arrhenius 方程输出的流变应力与实验值之 间的比较。为了便于计算,对应变速率产生的上凸或 下凹部分没有进行预测。由图 8 可知, 方程输出值与 实验值相差较大, AARE 达到 11.54%, R 仅为 0.9464, 最小相对误差为 2.91%, 最大相对误差达到了 45.20%, 误差范围分布较大。人工神经网络模型与 Arrhenius 方程模型相比,人工神经网络预测值离散程度低且误 差小,Arrhenius 方程模型预测值离散度较高,稳定性 差,如图9所示。

图 10 为变形温度对人工神经网络模型和 Arrhenius 本构方程模型精度的影响。由图 10 可以得 出,神经网络模型的预测精度高于本构方程模型。随 着温度的升高,两者的平均相对误差均有不同程度的 升高。在较低的温度时(250,350℃),本构方程模 型的相对误差稳定在 7%,神经网络模型的相对误差稳 定在1%。当温度升高时,本构方程模型预测值的相对 误差急剧升高,在450 ℃时相对误差达到22.3%,模 型稳定性较差。这是因为在变形过程中除了发生加工 硬化之外还有动态回复和再结晶,这些皆由扩散控制, 对温度较为敏感。另外在变形时,大部分形变能变为 热能使材料内部温度发生变化。本构方程并不能反映 这些影响,所以随着温度的升高本构方程模型误差升 高[22]。神经网络模型直接模拟流变应力与实验参数之 间的关系,消除了隐性的影响因素,模型较为稳定, 平均相对误差为 3%, 这与 Liu^[23]用神经网络模型预测 高速钢热压缩过程中流变应力的研究结果一致。







Fig.7 Comparisons between experimental and predicted flow stresses by artificial neural network (ANN): (a) $\dot{\varepsilon} = 10^{-5} \text{ s}^{-1}$, (b) $\dot{\varepsilon} = 10^{-4} \text{ s}^{-1}$, (c) $\dot{\varepsilon} = 10^{-2} \text{ s}^{-1}$, and (d) $\dot{\varepsilon} = 1 \text{ s}^{-1}$





Fig.8 Comparisons between experimental and predicted flow stresses by Arrhenius constitutive equation: (a) $\dot{\varepsilon} = 10^{-5} \text{ s}^{-1}$, (b) $\dot{\varepsilon} = 10^{-4} \text{ s}^{-1}$, (c) $\dot{\varepsilon} = 10^{-2} \text{ s}^{-1}$, and (d) $\dot{\varepsilon} = 1 \text{ s}^{-1}$



图 9 人工神经网络预测流变应力与 Arrhenius 方程输出流变应 力分别和实验值的比较

Fig.9 Comparisons of experimental data to the value of artificial neural network (a) and Arrhenius constitutive equation (b)



- 图 10 变形温度对人工神经网络模型和 Arrhenius 本构方程模型精度的影响
- Fig.10 Influence of temperature on the precision of artificial neural network (ANN) and Arrhenius constitutive

6 结 论

 超细晶纯钛在热压缩变形开始阶段,流变应力 迅速上升,产生急剧加工硬化。在稳态流变阶段,材 料发生软化。流变应力随温度的升高而降低,随应变 速率的降低而降低。

2) 经过训练后的人工神经网络模型预测热压缩 过程流变应力时的 R 和 AARE 分别为 0.9979 和 2.1%, 而 Arrhenius 本构方程模型为 0.9464 和 11.54%。相比 于 Arrhenius 本构方程,人工神经网络可以更精确地预 测超细晶纯钛在热变形过程中的流变应力。

3) 在变形温度升高时,Arrhenius 本构方程模型 误差急剧升高,模型稳定性低。人工神经网络模型的 AARE 随变形温度的升高只出现了小幅度上升,模型 稳定性高。

参考文献 References

- [1] Liu Xiaoyan(刘晓燕). *Thesis for Doctorate*(博士论文)[D]. Xi'an: University of Architecture and Technology, 2014
- [2] Liu X, Zhang Q, Zhao X et al. Materials Science & Engineering A[J], 2016, 676: 73
- [3] Vinogradov A Y, Stolyarov V V, Hashimoto S et al. Materials Science & Engineering A[J], 2001, 318(1–2): 163
- [4] Jia Fengbo(贾逢博), Yi Youping(易幼平), Huang Shiquan(黄 施全) et al. Hot Working Technology(热加工工艺)[J], 2010, 39(16):19
- [5] Zhu Y, Zeng W, Sun Y et al. Computational Materials Science[J], 2011, 50(5): 1785
- [6] Liu Haiding(刘海定), Tang Aitao(汤爱涛), Pan Fusheng(潘复生) et al. Light Alloy Fabrication Technology(轻合金加工技术)[J], 2006, 34(3): 48
- [7] Li Y F, Wang Z H, Zhang L Y et al. Transactions of Nonferrous Metals Society of China[J], 2015, 25(6): 1889
- [8] Chen G, Chen W, Ma L et al. Rare Metal Materials and Engineering[J], 2015, 44(9): 2120
- [9] Quan G Z, Lv W Q, Mao Y P et al. Materials & Design [J], 2013, 50(17): 51
- [10] Fine T L. Feed Forward Neural Network Methodology[M]. New York: Springer-Verlag New Your, Inc, 1999
- [11] Liu Y L, Yin J C, Jiang Y et al. Journal of Materials Science & Engineering[J], 2016, 34(2): 192
- [12] An Di(安 迪), Yan Liangming(闫亮明), Shi Ge(石 阁) et al. Light Alloy Fabrication Technology(轻合金加工技术)[J], 2016, 44(10): 56
- [13] Han Maosheng(韩茂盛), Tao Huan(陶 欢). China Metal Forging Equipment & Manufacturing Technology (锻压装备 与制造技术)[J], 2016, 51(6): 112
- [14] Gupta A K, Singh S K, Reddy S et al. Materials & Design[J], 2012, 35(223): 589

- [15] Lin Y C, Zhang J, Zhong J. Computational Materials Science[J], 2008, 43(4): 752
- [16] Liu J, Chang H, Hsu T Y et al. Journal of Materials Processing Technology[J], 2000, 103(2): 200
- [17] Zhu Jingchuan(朱景川), Wang Yang(王洋), Yue Yang(岳洋) et al. Heat Treatment Technology and Equipment(热处理技术与装备)[J], 2008, 29(1): 36
- [18] Zhang Jixian(张际先), Mi Xia(密 霞). Neural Network and Its Application in Engineering(神经网络及其在工程中的应 用)[M]. Beijing: China Machine Press, 1996
- [19] Zhou Kaili(周开利), Kang Yaohong(康耀红). Neural

Network Model and Its MATLAB Simulation Program Design(神经网络模型及其 MATLAB 仿真程序设计)[M]. Beijing: Tsinghua University Press, 2005

- [20] Sellars C M, McTegart W J. Acta Metall[J], 1966, 14(9): 1136
- [21] Tao Z J, Yang H, Li H et al. Rare Metals[J], 2016, 35(2): 162
- [22] He Jianhong(何建洪), Sun Yong(孙 勇), Duan Yonghua(段 永华) et al. Materials for Mechanical Engineering(机械工程 材料)[J], 2013, 37(3): 95
- [23] Liu J T, Chang H B, Wu R H et al. Journal of Materials Processing Technology[J], 2000, 103(2): 200

A Constitutive Model of Ultrafine Grained Pure Titanium Deformation at Elevated Temperature Based on Artificial Neural Network

Liu Xiaoyan^{1,2}, Yang Cheng¹, Yang Xirong^{1,2}, Qiang Meng¹, Zhang Qianqian¹

(1. Xi'an University of Architecture and Technology, Xi'an 710055, China)

(2. Metallurgical Engineering Technology Research Center of Shaanxi Province, Xi'an 710055, China)

Abstract: Ultrafine grained (UFG) pure titanium was prepared by ECAP up to four passes. The hot compression experiments were conducted at different temperatures ($250 \sim 450$ °C) and strain rates ($10^{-5} \sim 1 \text{ s}^{-1}$). The artificial neural network (ANN) and Arrhenius constitutive equation were used for establishing a constitutive model of UFG pure titanium. Experiments show that the flow stress increases with the increase of strain at the beginning of deformation, and then increases slowly. Finally, the stress reaches a stable value. The experimental and predicted values of flow stress show that the average absolute relative errors obtained from the artificial neural network model and the Arrhenius constitutive equation are 0.9979 and 0.9464, respectively. This means that the artificial neural network model can more accurately describe the constitutive relations of UFG pure titanium. By comparing the errors of the two models at different temperatures, it can be concluded that artificial neural network model has better stability under the condition of high temperature. **Key words:** ultrafine grained pure titanium; artificial neural network; Arrhenius constitutive equation neural network; Better stability under the condition of high temperature.

Corresponding author: Liu Xiaoyan, Ph. D., Associate Professor, School of Metallurgical Engineering, Xi'an University of Architecture and Technology, Xi'an 710055, P. R. China, Tel: 0086-29-82202923, E-mail: xauat-lxyan@hotmail.com