文章编号:1004-0609(2010)S1-s0468-05

TC17 钛合金片层组织动态球化的神经网络预测模型

王凯旋^{1,2}, 曾卫东¹, 赵永庆², 徐 斌³, 田 飞¹, 朱艳春¹, 张尧武¹, 周义刚¹

(1. 西北工业大学 材料学院,西安 710072;2. 西北有色金属研究院,西安 710016;3. 宝钢公司特殊钢分公司,上海 200940)

摘 要:在 Gleeble-1500 热模拟试验机上通过热压缩试验研究具有初始片层组织的 TC17 钛合金在变形温度为 780~860 、应变速率为 0.001~10 s⁻¹、变形量为 15%~75%范围内的组织演变,定量分析热变形参数对片层组织 动态球化过程的影响。采用结合贝叶斯归一化算法的 BP 人工神经网络,建立 TC17 钛合金片层组织动态球化演 变的预测模型,误差分析表明模型精度较好。

关键词:TC17 钛合金; 片层组织; 动态球化; 动力学; 人工神经网络 中图分类号:TG146.2 文献标识码: A

ANN model for prediction of dynamic globularization in TC17 titanium alloy

WANG Kai-xuan^{1, 2}, ZENG Wei-dong¹, ZHAO Yong-qing², XU Bin³, TIAN Fei¹, ZHU Yan-chun¹, ZHANG Yao-wu¹, ZHOU Yi-gang¹

(1. School of Materials Science and Engineering, Northwestern Polytechnical University, Xi'an 710072, China;

2. Northwest Institute for Nonferrous Metal Research, Xi'an 710016, China;

3. Special Steel Branch, Baoshan Iron & Steel Co., Ltd., Shanghai 200940, China)

Abstract: The isothermal hot compression on Gleeble–1500 system in the temperature range of 780-860 and strain rate range of $0.001-10 \text{ s}^{-1}$, was used to study the kinetics of microstructural evolution of TC17 titanium alloy with initial lamellar microstructure. The quantitative results show that dynamic globularization kinetics and kinetics rate are sensitive to deformation conditions. A model for predicting volume fraction of dynamic globularization was built based on the above quantitative results and BP artificial neural network (ANN) combined with Bayesian regularization. The well coincidence of the predicted results with measured ones shows the feasibility of the model.

Key words: TC17 titanium alloy; lamellar microstructure; dynamic globularization; kinetics; artificial neural network

TC17(Ti-5Al-4Mo-4Cr-2Sn-2Zr)钛合金是一种富β 稳定元素的α+β型两相钛合金,主要用于制造航空发 动机风扇、压气机盘^[1]。压气机盘各部位的服役环境 差异较大,其性能要求不同,各部位的显微组织要求 也就不同。锻造式双性能整体叶盘是通过控制各部位 在两相区的热变形参数,使得具有原始片层组织的坯 料在不同部位的组织发生不同程度演变,从而得到叶 片为等轴组织而轮盘仍为片层组织的理想组织分布。 以往对典型两相钛合金的研究结果表明,钛合金片层 组织动态球化演变与热变形工艺参数密切相关,且其 动力学特征与典型动态再结晶有一定差异,因而传统 的碳钢经验数学模型很难准确地表达钛合金片层组织 的动态球化演变^[1]。

人工神经网络(ANN)具有通过简单的非线性处理 单元的复合映射即可获得复杂的非线性处理的能力, 特别适用于解决一些繁重复杂的、采用传统方法很难

通信作者:王凯旋; 电话: 029-88494298; E-mail: kxwang_nwpu@yahoo.cn

处理的问题。ANN 自身不仅能够根据不完整和无序的 信息得出结论,而且可以从这些信息中概括出规律并 用于新的情况,是一种有力的模拟手段和预测工具。 ANN 已广泛应用于材料性能预测、工艺参数优化、相 变规律研究和微观组织模拟等方面^[2-4]。

本研究在实验的基础上建立了 TC17 钛合金片层 组织动态球化动力学预测的人工神经网络模型。

1 实验

实验用 TC17 钛合金由宝钢股份有限公司特殊钢 分公司提供,加工状态为单相区预制锻坯,原始组织 如图 1 所示。从图 1 可以看出:在粗大的原始 β 晶粒内 片层(或称针状) α 相交织成网篮状,晶内片层 α 相的长 度为 20~30 μ m、厚度约 0.5 μ m。采用金相法测定 $(\alpha+\beta)/\beta$ 相变点 t_β 均为 905 。



图1 TC17钛合金的原始片层组织

Fig.1 Micrographs of TC17 alloy with initial lamellar microstructures

沿锻坯轴向切取 $d8 \text{ mm} \times 12 \text{ mm}$ 的圆柱形试样, 在Gleeble-1500热模拟试验机上进行等温压缩试验。 变形温度均在 $\alpha+\beta$ 两相区,为780、800、820、840和 860 。应变速率选取0.001、0.01、0.1、1和10 s⁻¹; 在同一变形温度和应变速率条件下,变形量分别为 15%、30%、45%、60%和75%。试样加热到变形温度 后保温5 min,然后以恒应变速率压缩,达到预定变形 程度后立即水冷。沿变形试样纵截面对称线切割切取 金相试样。

由于圆柱试样端面与压头的接触产生摩擦,应变 的不均匀分布势必造成显微组织的不均匀。为了可靠 地分析热变形过程中片层组织的动态球化动力学,准 确地了解金相观察部位的局部应变值是十分重要的。 本文作者采用有限元软件DEFORM™-3D V5.0对 TC17钛合金热压缩变形过程进行数值模拟,获得了变 形试样各部位的局部应变值。

在同一试样上选取4个视场拍摄背散射SEM像, 采用面积法测量显微组织中球化α相的体积分数,其中 定义Feret Ratio 2.5的α相为球化α相^[5]。不同变形条件 下片层组织的动态球化体积分数f_{Dg}与金相观察点的 局部应变值有对应关系(见图2)^[6]。可以看出,随着变 形温度升高和应变速率降低,片层组织的动态球化体 积分数增大,且随着应变增大呈S型曲线增长。

2 BP人工神经网络算法

目前,绝大多数的人工神经网络模型采用了 BP (Back propagation)神经网络。以往发现在 BP 神经网络 的训练中,易出现"过适配"问题,即对于训练样本 集的样本误差可以很小,但对于样本集以外的新样本 数据其误差会很大,缺乏对新样本泛化的能力。目前, 提高网络泛化能力的主要方法有初期终止法和规则化 调整法。一般来讲,规则化调整法的综合性能要优于 初期终止法。贝叶斯正则化(Bayesian regulartion)是以 自动方式决定最佳误差性能调整率的一种方法。

此外, 传统 BP 算法通常采用梯度下降法, 这种 算法在应用中暴露出不少缺陷:易形成局部极小而得 不到全局最优,收敛速度慢等。Levenberg-Marquardt (L-M)算法是梯度下降法与高斯牛顿法的结合,既有高 斯牛顿法的局部收敛性,又有梯度下降法的全局特性, 可以有效地改善网络收敛性能。L-M 算法在提高神经 网络的收敛速度和降低训练误差方面具有明显优势, 而贝叶斯正则化算法在降低网络的泛化误差方面具有 优势。

3 TC17 钛合金片层组织动态球化的 神经网络预测模型

以变形温度、应变速率和应变3个热工艺参数作为 BP神经网络的输入元(变量),以动态球化体积分数作 为输出元(变量)来构建TC17钛合金片层组织动态球化 的预测模型。其中对应变、变形温度及动态球化体积



图2 TC17钛合金不同热变形条件下显微组织中的动态球化a相的体积分数

Fig.2 Volume fraction of dynamic globularized α phase vs strain for TC17 titanium alloy samples under different deformation conditions

分数选用线性函数进行归一化处理,对应变速率选用 对数函数结合线性函数进行归一化处理,以避免输入 参数不均匀性引起的网络学习误差。

BP网络神经元上的传递函数又称激活函数,是神 经网络的重要组成部分,必须是处处可微分。考虑模

型中输入、输出向量的取值范围,隐含层的激活函数 选用tan-sigmoid函数,输出层选用log-sigmoid函数。

BP神经网络隐含层及其各层单元数的选择是一 个十分复杂的问题。本模型采用已被广泛应用的3层 BP神经网络结构。隐含层节点数目增多,可以增强信 号处理和模式表达的能力;但过多的隐层节点会导致 网络学习时间延长,或者出现样本与网络规模的不适 配,出现过拟合现象。随着网络复杂程度和学习样本 数目的增加,其收敛速度变慢,学习时间长,误差不 一定最佳,容错性差,不能识别非样本数据(预测性 差),所以网络的规模不应随意增大。

本研究将隐含层神经元从1到20逐一增加,采用试 探法确定隐含层神经元数来优化网络结构。每次改变 神经元数之前,网络被多次训练(本研究不少于10次); 训练之前样本被重新随意分成两个大小不同的样本子 集,其中占2/3样本的大子集被用于网络训练,小样本 子集被用于预测检验;同时利用已训练的网络对小样 本子集进行预测,分析其预测值和试验测量值之间的 相关系数*R*。此外,本研究对比了采用和未采用贝叶 斯正则化的L-M训练算法的网络稳定性和预测精度。

图3所示为隐含层有不同神经元数的网络预测完



图3 不同隐含层神经元数及学习算法的BP网络模型性能 比较

Fig.3 Regression coefficients between neural network predictions and experimental data for different numbers of neurons in hidden layer for Levenberg-Marquardt training without (a) and with (b) Bayesian regularization

成后得到的动态球化体积分数相关系数R的平均值和 波动大小。

从图 3(a)可以看出,当神经元从1 增加到7时, 未采用贝叶斯正则化的网络获得的训练样本和预测样 本与各自试验值之间的相关系数 R 的平均值均快速增 大。当神经元继续增加时,训练样本与试验值之间的 相关系数 R 的平均值继续增大甚至逐渐接近1而趋于 理想状态;但预测样本与试验值之间的相关系数 R 的 平均值却不断下降,并且相关系数R的大幅度波动预 示着网络极不稳定和表现出"过拟合"现象。从图 3(b) 可以看出,采用贝叶斯正则化的网络的相关系数 R 波 动明显减小,说明网络具有良好的稳定性和避免了"过 拟合"现象。当神经元从1增加到12时,使用贝叶斯 归一化的网络获得的训练样本和预测样本与各自试验 值之间的相关系数 R 的平均值均不断增大;但当神经 元继续增加时,二者却无明显增大,不过神经元继续 增加会导致网络训练时间显著提高。综上分析,在保 证网络具有较好预测精度和运算效率的前提下,选取 隐层神经元为 12,网络采用贝叶斯归一化并结合动量 梯度下降学习函数 learngdm 训练。

选用非训练样本对 TC17 钛合金片层组织动态球 化的 BP 神经网络模型进行精度测试,预测结果与实 验值对比如图 4 所示。片层组织动态球化体积分数预 测值与实验测量值的最大绝对误差为 8.46%,平均相 对误差为 4.90%,结果表明该模型精度具有较高的精 度。图 5 所示为最终确定的 TC17 钛合金片层组织动 态球化预测的 BP 神经网络模型结构示意图。



图 4 TC17 钛合金片层组织动态球化预测模型误差 分析

Fig.4 Comparison of predictions from ANN model and experimental data of dynamic globularization in TC17 alloy



图 5 TC17 钛合金片层组织动态球化的 BP 神经网络预测模型结构图

Fig.5 Schematic diagram of NN capable of predicting dynamic globularization in TC17 alloy

4 结论

 基于热模拟压缩试验,定量分析了变形试样的 显微组织,建立了TC17钛合金片层组织动态球化体 积分数的BP神经网络预测模型,网络采用贝叶斯归 一化并结合动量梯度下降学习函数 learngdm 训练。

2) 该模型具有较高的精度和良好的稳定性,其最 大绝对误差为 8.46%,平均相对误差为 4.90%,可以 为工程中预测 TC17 钛合金片层组织的动态球化演变 做参考。

REFERENCES

- 王凯旋. TC17 钛合金片层组织演变与性能关系的定量研究
 [D]. 西安:西北工业大学, 2010.
 WANG Kai-xuan. Quantitative research on microstructural evolution and mechanical properties in TC17 titanium alloy with initial lamellar microstructure[D]. Xi'an: Northwestern Polytechnical University, 2010.
- [2] 曾卫东,舒 滢,周义刚.应用人工神经网络模型预测 Ti-10V-2Fe-3Al合金的力学性能[J].稀有金属材料与工程, 2004,33(10):1041-1044.
 ZENG Wei-dong, SHU Ying, ZHOU Yi-gang. Artificial neural

network model for the prediction of mechanical properties of Ti-10V-2Fe-3Al titanium alloy[J]. Rare Metal Materials and Engineering, 2004, 33(10): 1041–1044.

[3] 陈明和,谢兰生,周建华,左敦稳,王 珉.基于BP神经网络的TC4钛合金超塑性变形后组织及性能预测研究[J]. 机械工程材料, 2003, 27(12): 4-19.
 CHEN Ming-he, XIE Lan-sheng, ZHOU Jian-hua, ZUO

Dun-wen, WANG Min. Predicting mechanical properties and microstructure of TC4 alloy after superplastic forming based on BP artificial neural network[J]. Materials for Mechanical Engineering, 2003, 27(12): 4–19.

- [4] MALINOV S, SHA W. Application of artificial neural networks for modelling correlations in titanium alloys[J]. Mater Sci Eng A, 2004, 365: 202–211.
- [5] 王凯旋,曾卫东,邵一涛,赵永庆,周义刚.基于体视学原理的钛合金显微组织定量分析[J].稀有金属材料与工程,2009, 39(3):398-403.

WANG Kai-xuan, ZENG WEI-dong, SHAO Yi-tao, ZHAO Yong-qing, ZHOU Yi-gang. Quantification of microstructural features in titanium alloys based on stereology[J]. Rare Metal Materials and Engineering, 2009, 39(3): 398–403.

[6] WANG K X, ZENG W D, ZHAO Y Q, LAI Y J, ZHOU Y G. Dynamic globularization kinetics during hot working of Ti-17 alloy with initial lamellar microstructure[J]. Mater Sci Eng A, 2010, 527: 2559–256.

(编辑 袁赛前)