

Ti-25Nb 合金 BP 神经网络本构模型的建立

欧阳旭 王克鲁 吴俊慷 彭辉权
(南昌航空大学航空制造工程学院)

摘 要 采用 Gleeble-3500 型热模拟试验机对 Ti-25Nb 合金进行等温恒应变速率压缩试验,研究合金在 470~620 ℃,0.001~10 s⁻¹ 条件下的流动应力行为,并基于 BP 神经网络建立合金的本构模型。结果表明,Ti-25Nb 合金的真应力具有负温度、正应变速率敏感性,合金在试验变形条件下均呈现流动软化型特征。基于 BP 神经网络所建立的本构模型计算精度较高,其相关系数为 0.999 6,相对误差为 4.27%,平均绝对相对误差为 1.33%,能够较好地描述并预测 Ti-25Nb 合金的流动应力行为。

关键词 Ti-25Nb 合金;流动应力行为;本构模型;BP 神经网络

中图分类号 TG146.23;TP311
DOI:10.15980/j.tzzz.2021.04.007

文献标志码 A

开放科学(资源服务)标识码(OSID):



Construction of BP Neural Network Constitutive Model for Ti-25Nb Alloy

Ouyang Xu, Wang Kexu, Wu Junkang, Peng Huiquan

(School of Aeronautical Manufacturing Engineering, Nanchang Hangkong University)

Abstract: The isothermal constant strain rate compression test was carried out by a Gleeble-3500 thermal simulation tester. The flow stress behavior of Ti-25Nb alloy at 470~620 ℃ and 0.001~10 s⁻¹ was investigated and constitutive model was established based on BP neural network. The results reveal that the true stress of Ti-25Nb alloy has negative temperature and positive strain rate sensibility, showing the characteristics of flow softening under any deformation condition. The constitutive model based on BP neural network has a high calculation accuracy with correlation coefficient of 0.999 6, relative error of 4.27% and average absolute relative error of 1.33%, which can well describe and predict the flow stress behavior of Ti-25Nb alloy.

Key Words: Ti-25Nb Alloy, Flow Stress Behavior, Constitutive Model, BP Neural Network

钛合金具有良好的耐蚀性、适当的密度和优异的生物相容性,受到生物医学领域研究人员的广泛关注^[1]。加入适量 Nb 元素,Ti 合金中稳定的 β 相含量增加,具有更低的弹性模量,除对人体无毒无害外,还具有形状记忆等性能,在医用植入物领域具有良好的应用前景。

近年来,研究者对 Ti-Nb 合金进行了大量研究。郭孝云等^[2]研究 Nb 含量对 Ti-Nb 合金薄膜微观形貌与力学性能的影响,发现 Nb 能提高薄膜抵抗塑性变形的能力。万小军等^[3]研究合金元素对 β -Ti-25Nb 合金的结构稳定性与弹性的影响,发现 β 相中的 Ta 和 Mo

收稿日期:2020-10-21;修改稿收到日期:2020-11-03
基金项目:国家自然科学基金资助项目(51464035)
第一作者简介:欧阳旭,男,1996 年出生,学士,南昌(330063),E-mail:905360941@qq.com
通信作者:王克鲁,男,1968 年出生,教授,南昌(330063),E-mail:wangkulu@126.com
引用格式:欧阳旭,王克鲁,吴俊慷,等. Ti-25Nb 合金 BP 神经网络本构模型的建立[J]. 特种铸造及有色合金,2021,41(4):425-428.
OUYANG X, WANG K L, WU J K, et al. Construction of BP neural network constitutive model for Ti-25Nb alloy[J]. Special Casting & Nonferrous Alloys, 2021, 41(4):425-428.

[19] KOBAYASHI M, DORCE Y, TODA H, et al. Effect of local volume fraction of microporosity on tensile properties in Al-Si-Mg cast alloy[J]. Materials Science and Technology, 2010, 26(8): 962-967.

[20] 万谦,赵海东,葛继龙. 微观孔洞对铝合金压铸件疲劳性能的影响[J]. 中国有色金属学报,2015,25(3):568-574.

[21] WAN L, HU Z Q, WU S S, et al. Mechanical properties and fatigue behavior of vacuum-assist die cast AlMgSiMn alloy[J]. Materials Science Engineering, 2013, A576:252-258.

[22] HU C, ZHAO H D, WANG X L, et al. Microstructure and properties of AlSi12Fe alloy high pressure die-castings under different vacuum levels[J]. Vacuum, 2020, 180:109 561.

[23] SARFRAZ M H, JAHANZAIB M, AHMED W, et al. Multi-response parametric optimization of squeeze casting process for fabricating SiC/6061Al composite[J]. The International Journal of Advanced Manufacturing Technology, 2019, 102:759-773.

[24] ZHANG Y F, ZHENG J, XIA Y T, et al. Porosity quantification for ductility prediction in high pressure die casting AM60 alloy using 3D X-ray tomography[J]. Materials Science Engineering, 2020, A772:138 781.

(编辑:张正贺)

能提高相稳定性,增大体积模量、弹性模量和弹性常数;而 Zr 含量的增加使 β 相结构稳定性下降。张曙香等^[4]研究 Ti-35Nb 合金在冷轧和退火过程中的织构变化,发现 β 相 Ti-Nb 合金的微观结构对性能有影响,该合金沿轧板轧向具有低弹性模量。郭顺等^[5]研究新型亚稳 β 型 Ti-38Nb 合金,发现合金经固溶处理后,可实现低弹性模量和高强度之间的良好匹配。AHA I 等^[6]采用氢化钛、Nb 和 Fe 粉通过粉末冶金法制备了 β 型 Ti-40Nb 钛合金,探索了烧结条件对合金微观组织、腐蚀和摩擦腐蚀行为的影响。WENG X 等^[7]研究孔隙率对 Ti-25Nb 骨骼模型性能的影响,发现孔隙率为 70% 的 Ti-25Nb 合金更有利于新生骨的生长,可获得更坚固的骨-种植体界面。

目前,有关 Ti-Nb 合金本构模型的研究报道很少,而本构模型对研究合金流动应力行为是十分必要的。因此,本课题基于 Ti-25Nb 合金热压缩试验数据,采用 BP 神经网络以建立高精度本构模型,为 Ti-25Nb 合金医用植入物的有限元模拟提供基础数据,并对合金的性能研究提供参考。

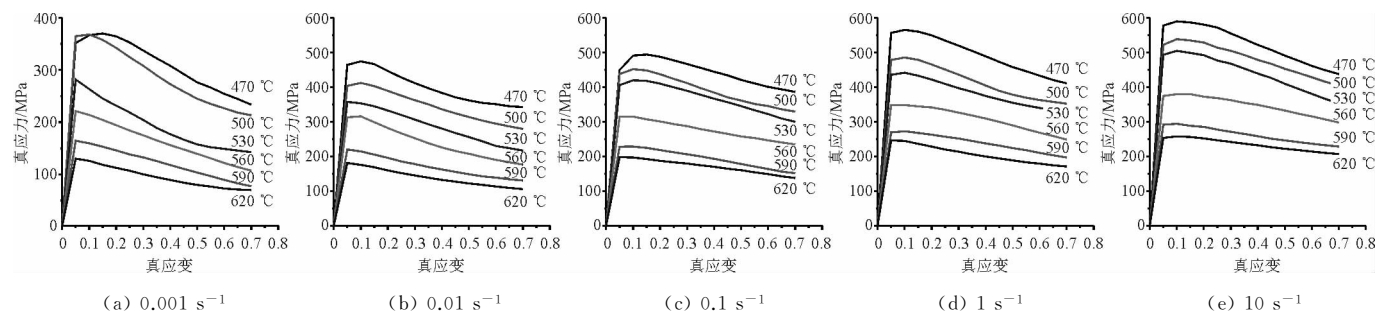


图 1 不同变形条件下 Ti-25Nb 合金的真应力-真应变曲线

Fig.1 True stress-strain curves of Ti-25Nb alloy under different deformation conditions

的进一步增加,合金的真应力达到峰值然后下降最后趋于稳定。

图 2 为不同变形条件下 Ti-25Nb 合金的峰值应力值。从图 2a 可以看出,恒应变速率时,随着变形温度升高,真应力有所下降,具有负温度敏感性。如当应变速率为 0.001 s^{-1} 时,变形温度由 $470 \text{ }^{\circ}\text{C}$ 提高到 $620 \text{ }^{\circ}\text{C}$,峰值应力下降了 236.3 MPa ;而当应变速率为 10 s^{-1} 时,峰值应力下降了 332.1 MPa 。这是因为随着变形温度升高,合金晶内发生了动态再结晶和动态回复现象^[8,9];同时晶界上原子的活性也得到提高,其结合力降低,使得滑移系增多,位错能够充分运动^[9],导致真应力有所下降。从图 2b 可以看出,恒变形温度时,随着应变速率增加,真应力有所上升,合金具有正应变速率敏感性。当变形温度为 $470 \text{ }^{\circ}\text{C}$ 时,应变速率由 0.001 s^{-1} 上升至 10 s^{-1} ,峰值应力提高了 223.2 MPa ;而当变形温度为 $620 \text{ }^{\circ}\text{C}$ 时,应变速率由 0.001 s^{-1} 上升至 10 s^{-1} ,

1 试验材料与方法

试验材料为 Ti-25Nb 合金,其化学成分(质量分数)为:74.93% 的 Ti,25.07% 的 Nb。将线切割后的 $\phi 8 \text{ mm} \times 12 \text{ mm}$ 的试样置于 Gleeble-3500 热模拟机上进行等温恒应变速率压缩试验,压缩变形温度分别为: 470 、 500 、 530 、 560 、 590 、 $620 \text{ }^{\circ}\text{C}$;应变速率分别为: 0.001 、 0.01 、 0.1 、 1 、 10 s^{-1} 。将试样以 $5 \text{ }^{\circ}\text{C/s}$ 的加热速率加热至变形温度后保温 300 s ,再进行压缩变形,然后水冷,整个过程均在真空环境下完成。在试样两端均匀涂抹润滑剂并加垫云母片以降低端面摩擦对结果的影响。通过热加工模拟试验机配置的专用数据采集软件,采集不同压缩试验参数下的流动应力和真应变数据。

2 真应力-真应变曲线分析

基于热加工模拟试验得到的压缩数据,图 1 为合金在不同变形条件下的真应力-真应变曲线。可以看出,在变形初始阶段,合金的真应力会随着变形量的增加迅速增大,此时合金的加工硬化占主导作用。随着变形量

峰值应力上升了 127.4 MPa 。这是因为随着应变速率增加,单位时间内位错形成增多,加工硬化现象明显,且合金的动态软化过程不能充分进行,导致真应力增大。

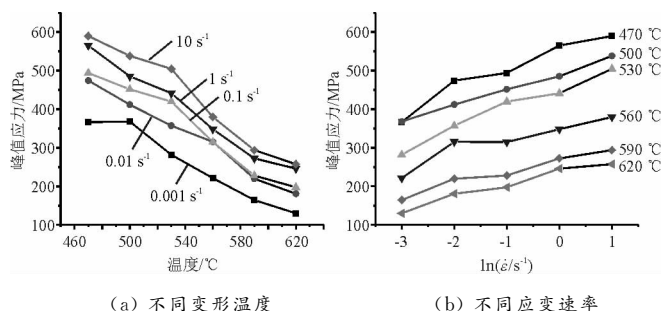


图 2 不同变形条件下 Ti-25Nb 合金的峰值应力值

Fig.2 Peak stress under of Ti-25Nb alloy different deformation conditions

结合图 1 和图 2 还可发现,随着应变增加,合金的动态软化速率均高于加工硬化速率,导致真应力不断

减小,合金的真应力-真应变曲线呈现流动软化特征。

3 BP 神经网络的建立

3.1 BP 神经网络样本选取

BP 神经网络在复杂的非线性关系中具有较好的适应能力,在合金流动应力的预测方面具有很好的应用^[10]。通常,金属材料在高温情况下发生塑性变形时本构关系可表示为:

$$\sigma = (\dot{\epsilon}, T, \epsilon) \tag{1}$$

式中, σ 为流动应力; $\dot{\epsilon}$ 为应变速率; T 为变形温度; ϵ 为应变。

因此,作为一种多层前反馈神经网络^[11],本课题将温度、应变速率和应变作为 BP 神经网络的输入样本数据,将流动应力作为输出数据,其网络结构见图 3。在设置输入层中输入样本数据时,以 Ti-25Nb 合金热压缩试验数据作为网络总体样本,将其分为训练样本数据和测试样本数据,其中选取不同温度、不同应变速率的 3 组数据作为测试样本数据以验证网络泛化能力,其余的为训练样本数据,具体样本数据分类见表 1。

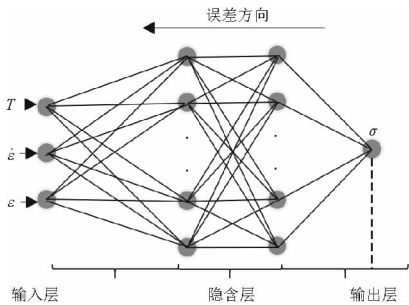


图 3 BP 神经网络结构

Fig.3 Structure of BP neural network

表 1 样本数据划分

Tab.1 Sample data division

温度/℃	应变速率/s ⁻¹				
	0.001	0.01	0.1	1	10
470	M	C	C	C	C
500	C	M	C	C	C
530	C	C	M	C	C
560	C	C	M	C	C
590	C	C	C	M	C
620	C	C	C	C	M

注: C 为训练样本数据; M 为测试样本数据

3.2 样本数据归一化处理

在进行数据的输入过程中,由于应变速率 $\dot{\epsilon}$ 、变形温度 T 、应变 ϵ 的数量级和单位存在显著差异,为消除数据量级对输入层函数的影响,需对样本数据在输入前进行归一化处理^[12]:

$$X' = 0.1 + 0.8 \cdot \frac{X - X_{\min}}{X_{\max} - X_{\min}} \tag{2}$$

式中, X 为样本输入数据; $X_{\max}$ 、 $X_{\min}$ 分别为样本输入数据中的最大值和最小值。

在数据输出时再进行反归一化处理:

$$Y' = X_{\min} + 1.25 \cdot (X_{\max} - X_{\min}) \cdot (Y - 0.1) \tag{3}$$

式中, Y 为样本输出数据; Y' 为反归一化输出数据。

3.3 BP 神经网络训练参数设置

由于 BP 神经网络的训练过程是通过信息的正向传递和误差的反向传播实现。BP 神经网络在训练过程中设置的参数会影响到训练的收敛速度、适配性、预测能力等问题^[13]。为了保证训练达到“适配”效果且系统误差较小, BP 神经网络应当选择合适的训练函数、学习函数和训练误差等参数。通过试错法,最终选择的训练函数为 traingdx 函数;学习函数为 learnngdm 函数;输入层到隐含层的激活函数为 tansig 函数以及隐含层到输出层的激活函数为 purelin 函数;学习速率为 0.1;训练误差的目标设置为 10^{-5} ,步数设置为 20 000。

采用单隐含层, BP 神经网络的隐含层的神经元个数可根据下式计算^[14,15]:

$$n = \sqrt{n_1 + n_2} + k \tag{4}$$

式中, n 为隐含层神经元个数; $n_1 = 3$, 为输入层神经元个数; $n_2 = 1$ 为输出层神经元个数; k 为常数。

为验证选择的神经元个数是否为最佳,可通过均方根误差 (R_{MSE}) 来进行评估:

$$R_{MSE} = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (E_i - P_i)^2} \tag{5}$$

式中, E_i 为试验值样本; P_i 为预测值样本; N 为样本的总数。通过计算可以得到,当隐含层神经元个数为 20 时, R_{MSE} 值达到最小。因此,可确定 BP-ANN 模型的网络结构为 3-20-1。

3.4 模型结果与验证

将 BP 神经网络模型采用上述参数设置,可计算出除训练样本数据外的测试样本数据 (470 ℃、0.001 s⁻¹, 500 ℃、0.01 s⁻¹, 530 ℃、0.1 s⁻¹, 560 ℃、0.1 s⁻¹, 590 ℃、1 s⁻¹, 620 ℃、10 s⁻¹)。将测试样本数据的计算值和试验值的误差通过相对误差 η 、平均绝对相对误差 A_{ARE} 进行定量分析:

$$\eta = \frac{E_i - P_i}{P_i} \times 100\% \tag{6}$$

$$A_{ARE} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left| \frac{E_i - P_i}{E_i} \right| \times 100\% \tag{7}$$

由式(6)和式(7)可计算出相对误差 η 、平均绝对相对误差 A_{ARE} 分别为 4.27% 和 1.33%,这说明测试样本数据的计算值具有较高的精度。

为更加准确地描述 BP 神经网络模型在所有试验

变形条件下的预测能力,将整个试验工艺参数下的真应力试验值和计算值进行对比,见图 4。可以看出,真应力试验值与 BP 神经网络的计算值两者的一致性很高,

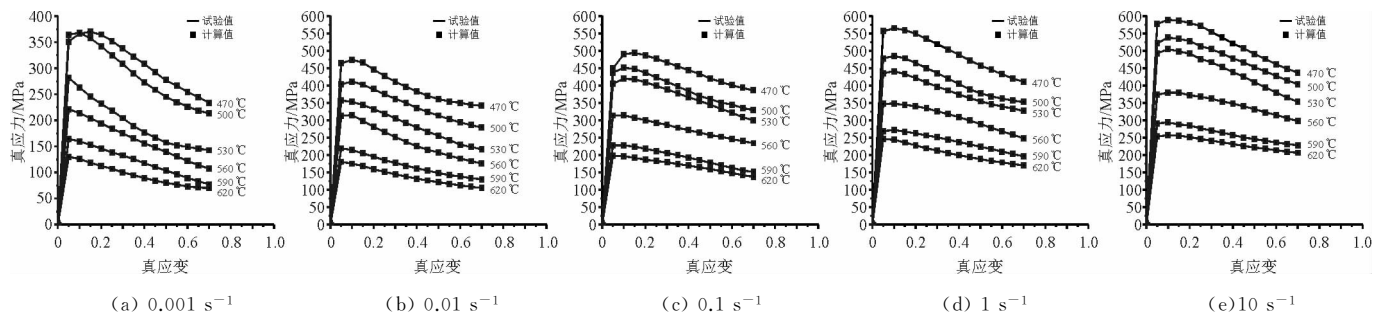


图 4 不同变形条件下真应力试验值和计算值对比曲线

Fig.4 Comparison curves of experimental and calculated true stress values under different deformation conditions

数下也有较高的计算精度。

4 结 论

(1) Ti-25Nb 合金真应力具有负温度、正应变速率敏感性,其真应力-真应变曲线在任意变形条件下均呈现流动软化型特征。

(2) Ti-25Nb 合金在 470~620 °C、0.001~10 s⁻¹ 热压缩变形条件下,采用 BP 神经网络建立本构模型。通过预测值和试验值之间的误差分析发现,其相关系数为 0.999 6,相对误差为 4.27%,平均绝对相对误差为 1.33%,所建立的本构模型计算精度较高,能够较好地描述并预测 Ti-25Nb 合金的流动应力行为。

参 考 文 献

- [1] 冯颖芳,康浩方,张震. 钛合金医用植入物材料的研究及应用[J]. 稀有金属, 2001(5): 349-354.
- [2] 郭孝云,肖祁陵,马昕迪,等. Nb 含量对 Ti-Nb 合金薄膜微观形貌与力学性能的影响[J]. 中国科学: 技术科学, 2020, 50(6): 801-810.
- [3] 万小军,吴昌义,林建国. 合金元素对 β -Ti-25Nb 合金的结构稳定性与弹性性质的影响[J]. 金属热处理, 2011(4): 16-20.
- [4] 张曙香,陈冷,孟利,等. Ti-35Nb 合金冷轧和退火织构的演变[J]. 中国体视学与图像分析, 2017, 22(2): 182-188.
- [5] 郭顺,郑琦,张俊松,等. 低弹性模量亚稳 β 型 Ti-38Nb 合金的微观组织与力学行为[J]. 稀有金属, 2015(9): 769-774.
- [6] AHA I, ALVES A, CHIRICO C, et al. Corrosion and tribocorrosion behavior of Ti-40Nb and Ti-25Nb-5Fe alloys processed by powder metallurgy[J]. Metallurgical and Materials Transactions, 2020, A51(6): 3 256-3 267.
- [7] WENG X, YANG H, XU J, et al. In vivo testing of porous Ti-25Nb alloy serving as a femoral stem prosthesis in a rabbit model [J]. Experimental & Therapeutic Medicine, 2016, 12(3): 1 323-1 330.
- [8] 杨建辉,张鹏,赵升吨. TC4-DT 钛合金热变形本构方程[J]. 塑性工程学报, 2016, 23(2): 120-125.
- [9] SHI N S, ZHANG C, VECCHIO K S. Phase stability dependence

其真应力试验值曲线与预测值基本重合,无较大的数据偏差。通过相关系数 R 进一步精确分析,可得 $R = 0.999 6$ 。以上结果说明,BP 神经网络模型在全试验参

of deformation mode correlated mechanical properties and elastic properties in Ti-Nb gum metal[J]. Materials Science and Engineering, 2017, A702: 173-183.

- [10] JALHAM I S. A comparative study of some network approaches to predict the effect if the reinforcement content on the hot strength of Al-base composites[J]. Journal of Materials Processing Technology, 2005, 166(3): 392-397.
- [11] LI P, XUE K, LU Y, et al. Neural network prediction of flow stress of Ti-15-3 alloy under hot compression[J]. Journal of Materials Processing Technology, 2004, 148(2): 235-238.
- [12] 何勇,张红钢,刘雪峰,等. NiTi 合金高温变形本构关系的神经网络模型[J]. 稀有金属材料与工程, 2008(1): 19-23.
- [13] GUO L F, LI B C, ZHANG Z M. Constitutive relationship model of TC21 alloy based on artificial neural network[J]. Transactions of Nonferrous Metals Society of China, 2013, 23(6): 1 761-1 765.
- [14] 周峰,王克鲁,鲁世强,等. Ti-22Al-24Nb-0.5Y 合金流变行为及 BP 神经网络高温本构模型[J]. 材料工程, 2019, 47(8): 141-147.
- [15] 石尚,董洪波,姜智勇,等. 基于 BP 神经网络的 TB17 钛合金热变形行为研究[J]. 特种铸造及有色合金, 2019, 39(4): 89-93.

(编辑:刘晨辉)

欢迎关注
“特种铸造”
微信公众号



- | | | |
|--------|---------|--------|
| ● 微官网 | ● 行业动态 | ● 联系我们 |
| ● 微商城 | ● 铸造前沿 | ● 免费推广 |
| ● 本刊会议 | ● 经典案例 | ● 铸造职场 |
| ● 收录动态 | ● 铸造学堂 | ● 产品库 |
| ● 稿件系统 | ● 专利与发明 | ● 企业库 |