



ЧИСЛЕНА ПРОЦЕДУРА ЗА ПРОВЕРКА НА ОПТИМАЛЕН СЪСТАВ НА ТИТАНОВА СПЛАВ ПРИ ИЗПОЛЗВАНЕ НА ОГРАНИЧЕНА ПО ОБЕМ БАЗА ОТ ДАННИ

Емил Иванов, Николай Тончев
skagrra@yahoo.com, tontchev@vtu.bg

**ВТУ „Тодор Каблешков”, София 1574, ул. “Гео Милев” № 158
БЪЛГАРИЯ**

Ключови думи: проектиране на сплави, титанови сплави, якостни и пластични свойства.

Резюме: В статията е предложена числена процедура за проверка на оптимален състав на сплавта по зададена стойност на изследваната величина и различни наблюдения за нея. Иновативността на този подход се състои в значителното намаляване на априорната информация. Основната особеност на метода е, че точността му зависи от точността на апроксимацията на данните, с които се разполага, както и фактът, че могат да се получат няколко решения в зависимост от степента на модела.

1. ВЪВЕДЕНИЕ

При оптимизацията на състава и свойствата на традиционно използвани или нови сплави и композиции в повечето случаи се разполага с ограничена предварителна информация. Тя може да се използва при уточняване на състава на изследвания клас материали при съответното термично и механично обработване. В тази връзка е необходимо да се създадат методики и подходи, даващи рационален резултат при ограничен брой данни, определени чрез състава на сплавта и характерни важни за проектирането свойства.

В [1-3] са разработени подходи, характеризиращи се с използването на достатъчен обем информация, чрез методите на моделиране с регресионен анализ и моделиране с изкуствени невронни мрежи, които е необходимо да могат да се проверят.

Постановка на задачата.

Целта на изследването е да предложи числена процедура, даваща възможност за проверка на оптимален състав на сплавта при използване на малка по обем база от данни между състави на композиции и свойствата им при едно и също обработване.

Предимството на процедурата се състои в използването на ограничена по обем база от данни, която може да бъде определена въз основа на предварителни изследвания. Намаляването на броя на наблюденията в извадката е следствие на свеждането на задачата до един обобщаващ параметър на химичния състав. За решаването на задача от този тип с апроксимация при използването на невронни модели са необходими повече от 300 експериментални стойности.

Решението на задачата се свежда до определяне на еднопараметрични модели, определящи влиянието на изследваните свойства от обобщените параметри на химическия състав на сплавта, чрез стандартни апроксимации. Изборът на определената апроксимация се определя на базата на най – високия коефициент на множествена корелация R.

Исходните данни със съставите и съответното свойство ще означим с $x_i^{(j)}, i = 1, 2, \dots, s$ и $j = 1, 2, \dots, N$, където s е броят на легиращите компоненти, а N е броят на съставите от базата с данни.

C $R_j, j = 1, 2, \dots, N$, се означава стойността на изходната величина, получена при отделните състави. В примера, разгледан по-долу, това е границата на провлачване. Фиксира се i , едно от числата $i = 1, 2, \dots, s$ и се осъществява следното. За избрано число k – степен на апроксимиращия полином - се определя с метода на най-малките квадрати полином $f_i(x)$ по данни

$$(x_i^{(j)}, R_j), j = 1, 2, \dots, N$$

По-строго математически: $\sum_{j=1}^N (f_i(x_i^{(j)}) - R_j)^2 \rightarrow \min$, като минимумът се взема по всички полиноми от степен k.

Нека искаме да проверим химически състав, осигуряващ стойност R^* . В този случай се решава уравнението $f_i(x) = R^*$, като се подбират единствено реални корени, попадащи в предварително известния интервал от стойности за величината x_i . Означават се с x_i^* . Получената s-ка числа $\bar{x}^* = (x_1^*, x_2^* \dots x_s^*)$, се сравнява със съответния състав на проверяваната сплав.

2. ТЕСТВАНЕ НА ПРОЦЕДУРАТА

Процедурата е избрана да се тества с конкретна база от данни за промишлени титанови сплави, посочени в Табл.1. В тази таблица са посочени и търговските означения на числено обработените марки титанови сплави. За някои от сплавите е извършено повече от едно наблюдение. По това дефинирано задание могат да се проверяват Парето-оптимални състави, получени по методика, отразена в [1]. Всички тези състави и съответните им характеристики са термичнообработени чрез закаляване и стареене. В Табл.1 за различните състави са посочени изследваната величина и нейният нормиран процент.

Таблица 1. База от данни на титановите сплави, обект на изследване [4]

Сплави	Al	Mo	Sn	Zr	Cr	Fe	V	Si	Rp0.2	Rp%
Ti-6Al-2Sn-1.5Zr-1Mo-0.35Bi-0.1Si	6,00	1,00	2,00	1,50	0,00	0,15	0,00	0,10	930	42,708
Ti-6Al-2Sn-1.5Zr-1Mo-0.35Bi-0.1Si	6,00	1,00	2,00	1,50	0,00	0,15	0,00	0,10	940	43,75
Ti-5Al-2Zr-2Mo-0.25Si	5,00	2,00	0,00	2,00	0,00	0,15	0,00	0,25	900	39,583
Ti-6Al-2Sn-4Zr-2Mo (Allvac)	6,00	2,00	2,00	4,00	0,00	0,15	0,00	0,08	966	46,458

Ti-11Sn-5Zr-2.25Al-1Mo-0.25Si	2,25	1,00	11,00	5,00	0,00	0,15	0,00	0,25	970	46,875
Ti-11Sn-1Mo-2.25Al-5Zr-0.2Si	2,25	1,00	11,00	5,00	0,00	0,15	0,00	0,20	520	0
Ti-8Al-1Mo-1V	8,00	1,00	0,00	0,00	0,00	0,15	1,00	0,00	1070	57,292
Ti-8Al-1Mo-1V (Allvac)	8,00	1,00	0,00	0,00	0,00	0,15	1,00	0,00	966	46,458
Ti-10V-2Fe-3Al	3,00	0,00	0,00	0,00	0,00	2,00	10,00	0,00	1200	70,833
Ti-10V-2Fe-3Al	3,00	0,00	0,00	0,00	0,00	2,00	10,00	0,00	1240	75
Ti-11.5Mo-6Zr-4.5Sn	0,00	11,50	4,50	6,00	0,00	0,15	0,00	0,00	1007	50,729
Ti-11.5Mo-6Zr-4.5Sn	0,00	11,50	4,50	6,00	0,00	0,15	0,00	0,00	610	9,375
Ti-3Al-8V-6Cr-4Mo-4Zr	3,00	4,00	0,00	4,00	6,00	0,15	8,00	0,00	759	24,856
Ti-11.5V-2Al-2Sn-11Zr	2,00	0,00	2,00	11,00	0,00	0,15	11,50	0,00	725	21,354
Ti-13V-11Cr-3Al	3,00	0,00	0,00	0,00	11,00	0,15	13,00	0,00	1140	64,583
Ti-13V-11Cr-3Al	3,00	0,00	0,00	0,00	11,00	0,15	13,00	0,00	1140	64,583
Ti-13V-2.7Al-7Sn-2Zr	2,70	0,00	7,00	2,00	0,00	0,15	13,00	0,00	1290	80,208
Beta-CEZ	5,00	4,00	2,00	4,00	2,00	1,00	0,00	0,00	1480	100
Ti-5Al-2Sn-2Zr-4Mo-4Cr (Ti-17)	5,00	4,00	2,00	2,00	4,00	0,15	0,00	0,00	1050	55,208
Ti-6Al-2Sn-4Zr-6Mo	6,00	6,00	2,00	4,00	0,00	0,15	0,00	0,00	1040	54,167
Ti-6Al-2Sn-4Zr-6Mo(Allvac)	6,00	6,00	2,00	4,00	0,00	0,15	0,00	0,00	1104	60,833
Ti-6Al-2Sn-4Zr-6Mo	6,00	6,00	2,00	4,00	0,00	0,15	0,00	0,00	1140	64,583
Ti-6Al-2Sn-4Zr-6Mo	6,00	6,00	2,00	4,00	0,00	0,15	0,00	0,00	1100	60,417
Ti-6Al-4V (Grade 5)	6,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,15	4,00	0,00	965	46,354
Ti-6Al-6V-2Sn	6,00	0,00	2,00	0,00	0,00	0,15	6,00	0,00	897	39,224
Ti-7Al-4Mo	7,00	4,00	0,00	0,00	0,00	0,15	0,00	0,00	1035	53,646
Ti-4Al-3Mo-1V	4,00	3,00	0,00	0,00	0,00	0,15	1,00	0,00	1100	60,417
Ti-5Al-1.5Fe-1.4Cr-1.2Mo-	5,00	1,20	0,00	0,00	1,40	1,50	0,00	0,00	1172	67,917
Ti-5Al-2.5Fe	5,00	0,00	0,00	0,00	0,00	2,50	0,00	0,00	1055	55,729
Ti-5Al-2.5Fe	5,00	0,00	0,00	0,00	0,00	2,50	0,00	0,00	935	43,229
VT22	5,20	4,70	0,00	0,00	1,30	1,00	4,70	0,00	883	37,813

Като примери за обобщен показател на химичния състав вече не служат използваните в литературата [1] различни зависимости за легиращия еквивалент. В това изследване съответната матрица, изобразена на Фиг.1, е с детерминанта, много близка до нула и по тази причина тя беше сменена с единичната матрица. Легиращият еквивалент в случая се определя чрез зависимост на съдържанието на отделните легиращи елементи. Броят на уравненията съвпада с броя на химическите съставки на сплавта.

	C	Si	Mn	Ni	Cr	Mo	V
1	1	1	1	1	1	1	1
	25	16	60	20	40	15	
1	1	1	1	1	1	1	1
	24	6	40	5	4	14	
1	1	1	1	1	1	1	1
	24	10	40	5	4	10	
1	1	1	1	1	1	1	1
	20	20	20	20	20	20	
1	0	1	1	1	1	1	1
		6	15	5	5	5	
1	1	1	1	1	1	1	1
	30	20	60	20	15	10	
1	1	1	1	1	1	1	1
	6	6	15	5	5	5	

Фиг. 1. Матрица на обобщения показател на химичния състав, използван при стоманите

С определените от Табл.1.данни се пресмятат зависимоститеза границата на провлачване във функция на обобщенияпоказател($R_{p02} = f(Cekv)$).

3. РЕЗУЛТАТИ

Съответните елементи са означени както следва: алуминий - x_1 , молибден - x_2 , калай - x_3 , цирконий - x_4 , хром - x_5 , желязо - x_6 , ванадий - x_7 и силиций - x_8 .

Таблица 2. Модели на границата на провлачване в зависимост от обобщения показател на химичния състав

Модели, отразяващи зависимостта на границата на провлачване от еквивалента на отделните легиращи елементи	Модели, отразяващи зависимостта на нормираната граница на провлачване от еквивалента на отделните легиращи елементи
$R_{p02} = 0,7253x_1^3 - 19,494x_1^2 + 137,26x_1 + 762,99$	$R_{p02}\% = 0,0756x_1^3 - 2,03061x_1^2 + 14,298x_1 + 25,311$
$R_{p02} = -1,9488x_2^3 + 28,294x_2^2 - 88,171x_2 + 1041,1$	$R_{p02}\% = -0,203x_2^3 + 2,9473x_2^2 - 9,1844x_2 + 54,286$
$R_{p02} = -1,2814x_3^3 + 16,274x_3^2 - 49,802x_3 + 1045,2$	$R_{p02}\% = -0,1335x_3^3 + 1,6952x_3^2 - 5,1877x_3 + 54,712$
$R_{p02} = 1,7664x_4^3 - 28,991x_4^2 + 74,806x_4 + 1047,1$	$R_{p02}\% = 0,184x_4^3 - 3,0199x_4^2 + 7,7923x_4 + 54,907$
$R_{p02} = 5,1357x_5^3 - 77,64x_5^2 + 246,64x_5 + 984,55$	$R_{p02}\% = 0,535x_5^3 - 8,0875x_5^2 + 25,692x_5 + 48,39$
$R_{p02} = -76,399x_6^3 + 136,29x_6^2 + 158,3x_6 + 947,09$	$R_{p02}\% = -7,9583x_6^3 + 14,196x_6^2 + 16,489x_6 + 44,488$
$R_{p02} = 0,2656x_7^3 - 1,484x_7^2 - 13,091x_7 + 1003,8$	$R_{p02}\% = 0,0277x_7^3 - 0,1546x_7^2 - 1,3636x_7 + 50,395$
$R_{p02} = 357262x_8^3 - 118790x_8^2 + 6921,8x_8 + 1043,9$	$R_{p02}\% = 37215x_8^3 - 12374x_8^2 + 721,02x_8 + 54,574$

По данни от Табл.2 за две стойности на изследваната величина са получени състави, посочени в следната Табл.3.

Таблица 3. Състави за две от проверяваните стойности на изследваната величина

Rp ₀₂	Al	Mo	Sn	Zr	Cr	Fe	V	Si
935 МПа	1,60	10,79	9,57	4,78	4,88	2,60	4,89	0,095
					10,42		7,61	0,25
1040 МПа	3,67	0,013	0,11	3,33	0,24	0,45	11,11	0,076
	6,00	4,51			4,13			2,43

4. ИЗВОДИ

Предложена е числена процедура за проверка на състава по зададена стойност на изследваната величина и различни наблюдения за нея. Иновативността на този подход се състои в значителното намаляване на априорната информация поради свеждането на променливите от осем – десет до една. Това благоприятства експеримента в металургията, който е скъп и информацията от него трудно се възпроизвежда. Изследването е осъществено с различни линейни комбинации на обобщените параметри на химическия състав и то може да бъде успешно прилагано и за метални материали не само на титанова основа, в случай че се използва друга база от данни.

Основната особеност на метода е, че точността му зависи от точността на апроксимацията на данните, с които се разполага, както и фактът, че могат да се получат няколко решения, за подбирането на едно от които е необходим друг опит, напр. технологичен.

ЛИТЕРАТУРА:

1. Tontchev N. Materials Science, Effective solutions and Technological variants, 2014/3/3, LAMBERT Academic Publishing
2. Tontchev N., Z. Cekerevac Approach and Application in Multicriteria Decision Support in the Field of Materials Science. MEST Journal, January, 2014(accepted paper).
3. Tontchev N., S. Popov, P. Koprinkova-Hristova, S. Popova, Y. Lukarski. (2011). Comparative study on intelligent and classical modeling and composition optimization of steel alloys, Journal of Materials Sciences and Engineering with Advanced Technology, 4(1), 69-91.
4. Malinov, S, Sha, McKeown, J.J.: Modelling and Correlation between Processing Parameters and Properties of Titanium Alloys using Artificial Neural Network. Computational Material Science 21, 375--394 (2001)
5. Gorni A.A. Steel forming and heat treating, Handbook, Brazil, 2013.
6. Tontchev N., N. Hristov, Numerical Procedure to Determine the Optimal Composition of the Steel a Small Volume Database with the Same Treatment, International

virtual journal for science, technics and innovations for the industry, Machines, Technologies, Materials, VII, Issues 11, pp. 54 – 57, 2013.

A NUMERICAL PROCEDURE FOR CHECKING OPTIMAL COMPOSITION OF TITANIUM ALLOY USING A SMALL BASE OF DATA

Emil Ivanov, Nikolay Tonchev
skagrra@yahoo.com, tontchev@vtu.bg

Todor Kableskov University of Transport
158 Geo Milev Str., 1574 Sofia,
BULGARIA

Key words: *metallurgical design, titanium alloys, tensile properties, composition-processing-property correlation*

Abstract: *Here is proposed a numerical procedure for checking the composition on alloy percentage and various observations about it. The innovation of this approach is the significant reduction of a priori information. The main characteristic of the method is that its accuracy depends on the accuracy of the approximation of the available data, as well as the fact of the receipt of more than one decision depending on the degree of the model.*