



**ДВУКРИТЕРИАЛЕН ОПТИМИЗАЦИОНЕН ПОДХОД С
ПРИЛОЖЕНИЕ В МЕТАЛУРГИЯТА ЗА ТЪРСЕНЕ ИНТЕРВАЛ НА
ПАРАМЕТРИТЕ ПРИ УДОВЛЕТВОРЯВАНЕ НА ПРЕДВАРИТЕЛНО
ПОСТАВЕНИ ИЗИСКВАНИЯ ЗА ПРОМЕНЛИВИТЕ**

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

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

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

***Резюме:** В статията е представен подход и са утвърдени техники за определяне на компромисни решения при удовлетворяване на точно определени изисквания за свойствата на сплавите. За примерни конкретни свойства при изследвани титанови сплави се посочват възможните интервали на легиращите елементи. Концептуално, този подход е приложим за проектиране и оптимизация на произволни сплави, тъй като на практика той не зависи от използваната база от данни. Подходът разширява предишни наши изследвания и обхваща допълнителни цели.*

1. ВЪВЕДЕНИЕ

Численото проектиране на състава и режима на обработването в металургията е задача с особена сложност поради многовариантната си природа. Много малки количества от концентрациите на легиращи елементи и комбинации от тях могат да доведат до значителни изменения на физичните и механичните свойства на сплавите. Това обстоятелство определя необходимостта от търсенето на най-подходящите концентрации за конкретните легиращи елементи. Познавайки се на богатата информация от компаниите и на различни бази от данни при изследване на зависимостите от тези концентрации, е възможно да се направят ценни предложения, подобряващи параметрите на създаваните изделия и технологии. Проектирането, използващо различни числени подходи, е в състояние да насочи експерта към състав и обработка на сплави от определен клас в металургията по систематичен и ефективен начин. С относително прост математически апарат може да се постигне ефективно изпълнение при прогнозирането на границата на провлачване и удължение на проби при изпитването на сплавта.

Изследването е част от серия подходи и методики, които в етапа на генериране на решението не използват знания, натрупани в областта на металургията. Направеното

предложение има потенциал за предсказване на механичните показатели на сплави, подобно на това в [1], като се използва предварителна информация за данни, осъществяващи връзката състав – обработка - свойства. Основното предимство на този подход се състои във възможността за създаване и проектиране на сплави, отговарящи на предварително поставени потребителски изисквания относно комплекса от свойства, осигуряващи конкретно приложение.

Целта на изследването е създаването на подход за предсказване на възможните концентрации на легиращи елементи или техни интервали, така че да се създадат сплави с желан комплекс от свойства. Тази концепция за проектиране е илюстрирана с помощта на експериментални данни. Така се показва, че подходът има потенциал за създаване на нови композиции със значително по-добри зададени свойства.

2. ПОСТАНОВКА НА ЗАДАЧАТА

Традиционната стратегия за развитие на сплавите се състои в производство на многобройни проби с променящ се състав и вариации на елементите и режимите на обработка, за да се определи сплав с оптимални свойства [2]. Този подход води до високи разходи за експериментиране [2,3]. Именно затова измежду методите за насочено търсене методът „проба-грешка“ стои най-ниско в йерархията на методите. Алтернативен ефективен подход е да се използват данни от предишен опит, обработени до статистичен модел – базиран на количество данни, свързани като състав – обработка - свойства. В сравнение с физическите модели, предимството на статистическите модели се крие в способността им да проучат комплекса от информация по своевременен и ефективен начин, дори когато не съществуват добре установени физични теории и модели. Резултатите от анализа на моделите и на оптимизацията им могат да дадат насока за по-нататъшно експериментално и изчислително изследване [4,5]. Вместо извършване на реални експерименти подходът на изчислителното проектиране на сплавта съчетава физически модели на известни взаимодействия между състав, обработка и свойства, за да се предскаже комбинация между състава на сплавта и съответния ѝ комплекс от характеристики. Увеличаването на броя на променливите обикновено води до драстично увеличение на сложността на физико-математическите модели.

Едно развитие на цитираните идеи е включване в изследването на многокритериалната оптимизация, защото в областта на материалознанието се изследват едновременно множество критерии. За определено удовлетворяване на тези критерии е необходимо да се определи химичен състав и вид обработване. Така описаната задача може да се формулира по следния начин.

Да се намери оптимален (целесъобразен) химически състав на сплав на титанова основа при зададени потребителски параметри и конструктивни предпочитания спрямо нейните основни физико-механични свойства. Задачата се формулира като двукритериална оптимизационна задача:

$$\vec{Z}(\vec{x}) = (K_1(\vec{x}), K_2(\vec{x})) \rightarrow \max$$

$$\vec{x} = (x_1, \dots, x_n) \in R^n,$$

$$x_i \in [a_i, b_i], i = 1, \dots, n,$$

където: K_1 и K_2 са частните критерии на качеството (физико-механичните характеристики на материала), x_1, \dots, x_n са оптимизируемите параметри, - процентният дял на химическите елементи, определящ механичните качества на материала, а под „max“ следва да се разбира оптимум в смисъла на Парето.

Това изследване се основава на използване и специална адаптация на оптимизиращ алгоритъм, описан в [1] специално за задача за оптимизиране свойства на сплави. При това се търси Парето-оптимум на две противоречащи си свойства, важни за механичните характеристики на сплавта - якостта $R_{p0,2}$ [MPa] и пластичността на сплавите E [%].

3. ОПИСАНИЕ НА ПРОЦЕДУРАТА

За осъществяване на предлагания подход е необходима предварителна база от данни, с помощта на която да се изведат регресионни модели за всяка компонента от състава и съответното свойство. В. Табл. 1 е представена базата от данни от входни и изходни параметри, с които е осъществена графичната интерпретация на подхода.

Предимството на статистическия модел е, че той може да бъде представен като уравнение с проста структура, което е подходящо за получаване на качествени или количествени оценки. Статистическият модел е в състояние не само да опише нелинейните влияния на легирането върху сплавта от металургична гледна точка, но също така и да отрази цялостната информация в рамките на данните.

Таблица 1. Данни за съставите на композицията и съответстващите им характеристики

| Сплави | Параметри | Химичен състав на композицията в[%] | | | | | | | Стойности на реални и нормирани свойства | | | | |
|-----------------------------------|-----------|-------------------------------------|------|------|------|------|------|------|--|------------|-----------|------|---------|
| | | Al | Mo | Sn | Zr | Cr | Fe | V | Si | $R_{p0,2}$ | R_p [%] | E | E [%] |
| Ti-6Al-2Sn-1.5Zr-1Mo-0.35Bi-0.1Si | | 6,0 | 1,0 | 2,0 | 1,5 | 0,0 | 0,15 | 0,0 | 0,10 | 930 | 42,71 | 16,0 | 77,78 |
| Ti-6Al-2Sn-1.5Zr-1Mo-0.35Bi-0.1Si | | 6,0 | 1,0 | 2,0 | 1,5 | 0,0 | 0,15 | 0,0 | 0,10 | 940 | 43,75 | 19,0 | 94,44 |
| Ti-5Al-2Zr-2Mo-0.25Si | | 5,0 | 2,0 | 0,0 | 2,0 | 0,0 | 0,15 | 0,0 | 0,25 | 900 | 39,58 | 13,0 | 61,11 |
| Ti-6Al-2Sn-4Zr-2Mo (Allvac) | | 6,0 | 2,0 | 2,0 | 4,0 | 0,0 | 0,15 | 0,0 | 0,08 | 966 | 46,46 | 15,0 | 72,22 |
| Ti-11Sn-5Zr-2.25Al-1Mo-0.25Si | | 2,25 | 1,0 | 11,0 | 5,0 | 0,0 | 0,15 | 0,0 | 0,25 | 970 | 46,88 | 8,0 | 33,33 |
| Ti-11Sn-1Mo-2.25Al-5Zr-0.2Si | | 2,25 | 1,0 | 11,0 | 5,0 | 0,0 | 0,15 | 0,0 | 0,20 | 520 | 0 | 20,0 | 100 |
| Ti-8Al-1Mo-1V | | 8,0 | 1,0 | 0,0 | 0,0 | 0,0 | 0,15 | 1,0 | 0,0 | 1070 | 57,29 | 17,0 | 83,33 |
| Ti-8Al-1Mo-1V (Allvac) | | 8,0 | 1,0 | 0,0 | 0,0 | 0,0 | 0,15 | 1,0 | 0,0 | 966 | 46,46 | 15,0 | 72,22 |
| Ti-10V-2Fe-3Al | | 3,0 | 0,0 | 0,0 | 0,0 | 0,0 | 2,00 | 10,0 | 0,0 | 1200 | 70,83 | 6,0 | 22,22 |
| Ti-10V-2Fe-3Al | | 3,0 | 0,0 | 0,0 | 0,0 | 0,0 | 2,00 | 10,0 | 0,0 | 1240 | 75 | 3,0 | 5,556 |
| Ti-11.5Mo-6Zr-4.5Sn | | 0,0 | 11,5 | 4,5 | 6,0 | 0,0 | 0,15 | 0,0 | 0,0 | 1007 | 50,73 | 17,0 | 83,33 |
| Ti-11.5Mo-6Zr-4.5Sn | | 0,0 | 11,5 | 4,5 | 6,0 | 0,0 | 0,15 | 0,0 | 0,0 | 610 | 9,375 | 19,0 | 94,44 |
| Ti-3Al-8V-6Cr-4Mo-4Zr | | 3,0 | 4,0 | 0,0 | 4,0 | 6,0 | 0,15 | 8,0 | 0,0 | 759 | 24,86 | 17,0 | 83,33 |
| Ti-11.5V-2Al-2Sn-11Zr | | 2,0 | 0,0 | 2,0 | 11,0 | 0,0 | 0,15 | 11,5 | 0,0 | 725 | 21,35 | 13,0 | 61,11 |
| Ti-13V-11Cr-3Al | | 3,0 | 0,0 | 0,0 | 0,0 | 11,0 | 0,15 | 13,0 | 0,0 | 1140 | 64,58 | 7,0 | 27,78 |
| Ti-13V-11Cr-3Al | | 3,0 | 0,0 | 0,0 | 0,0 | 11,0 | 0,15 | 13,0 | 0,0 | 1140 | 64,58 | 7,0 | 27,78 |
| Ti-13V-2.7Al-7Sn-2Zr | | 2,7 | 0,0 | 7,0 | 2,0 | 0,0 | 0,15 | 13,0 | 0,0 | 1290 | 80,21 | 2,0 | 0 |
| Beta-CEZ | | 5,0 | 4,0 | 2,0 | 4,0 | 2,0 | 1,00 | 0,0 | 0,0 | 1480 | 100 | 2,0 | 0 |
| Ti-5Al-2Sn-2Zr-4Mo-4Cr (Ti-17) | | 5,0 | 4,0 | 2,0 | 2,0 | 4,0 | 0,15 | 0,0 | 0,0 | 1050 | 55,21 | 11,0 | 50 |
| Ti-6Al-2Sn-4Zr-6Mo | | 6,0 | 6,0 | 2,0 | 4,0 | 0,0 | 0,15 | 0,0 | 0,0 | 1040 | 54,17 | 15,0 | 72,22 |
| Ti-6Al-2Sn-4Zr-6Mo(Allvac) | | 6,0 | 6,0 | 2,0 | 4,0 | 0,0 | 0,15 | 0,0 | 0,0 | 1104 | 60,83 | 10,0 | 44,44 |
| Ti-6Al-2Sn-4Zr-6Mo | | 6,0 | 6,0 | 2,0 | 4,0 | 0,0 | 0,15 | 0,0 | 0,0 | 1140 | 64,58 | 8,0 | 33,33 |
| Ti-6Al-2Sn-4Zr-6Mo | | 6,0 | 6,0 | 2,0 | 4,0 | 0,0 | 0,15 | 0,0 | 0,0 | 1100 | 60,42 | 6,0 | 22,22 |
| Ti-6Al-4V (Grade 5) | | 6,0 | 0,0 | 0,0 | 0,0 | 0,0 | 0,15 | 4,0 | 0,0 | 965 | 46,35 | 8,0 | 33,33 |
| Ti-6Al-6V-2Sn | | 6,0 | 0,0 | 2,0 | 0,0 | 0,0 | 0,15 | 6,0 | 0,0 | 897 | 39,22 | 12,0 | 55,56 |

| | | | | | | | | | | | | |
|---------------------------|-----|-----|-----|-----|-----|------|-----|-----|------|-------|------|-------|
| Ti-7Al-4Mo | 7,0 | 4,0 | 0,0 | 0,0 | 0,0 | 0,15 | 0,0 | 0,0 | 1035 | 53,65 | 10,0 | 44,44 |
| Ti-4Al-3Mo-1V | 4,0 | 3,0 | 0,0 | 0,0 | 0,0 | 0,15 | 1,0 | 0,0 | 1100 | 60,42 | 4,0 | 11,11 |
| Ti-5Al-1.5Fe-1.4Cr-1.2Mo- | 5,0 | 1,2 | 0,0 | 0,0 | 1,4 | 1,50 | 0,0 | 0,0 | 1172 | 67,92 | 11,0 | 50 |
| Ti-5Al-2.5Fe | 5,0 | 0,0 | 0,0 | 0,0 | 0,0 | 2,50 | 0,0 | 0,0 | 1055 | 55,73 | 4,0 | 11,11 |
| Ti-5Al-2.5Fe | 5,0 | 0,0 | 0,0 | 0,0 | 0,0 | 2,50 | 0,0 | 0,0 | 935 | 43,23 | 14,5 | 69,44 |
| VT22 | 5,2 | 4,7 | 0,0 | 0,0 | 1,3 | 1,00 | 4,7 | 0,0 | 883 | 37,81 | 7,0 | 27,78 |

След изведените еднопараметрични зависимости за всяко едно свойство поотделно и за всяка една компонента от състава се задават прагове на двата критерия, над които се търсят съставите на сплавта, попадащи в определен интервал на концентрациите. Големината на интервала на концентрациите на отделните легиращи елементи зависи от разположението на праговете на двата критерия.

Таблица 2. Модели на границата на провлачване и на относителното за съответните легиращи елементи

| № | Елемент | Зависимост на границата на провлачване | Зависимост на относителното удължение |
|---|---------|---|---|
| 1 | Al | $y = 0,0756x^3 - 2,03061x^2 + 14,298x + 25,311$ | $y = 0,2624x^3 + 6,3237x^2 - 35,597x + 92,965$ |
| 2 | Mo | $y = -0,203x^3 + 2,9473x^2 - 9,1844x + 54,286$ | $y = 0,4642x^3 - 7,0952x^2 + 24,778x + 37,896$ |
| 3 | Sn | $y = -0,1335x^3 + 1,6952x^2 - 5,1877x + 54,712$ | $y = 0,2729x^3 - 4,2957x^2 + 16,351x + 40,747$ |
| 4 | Zr | $y = 0,184x^3 - 3,0199x^2 + 7,7923x + 54,907$ | $y = -0,1513x^3 + 1,9827x^2 - 1,3996x + 40,753$ |
| 5 | Cr | $y = 0,535x^3 - 8,0875x^2 + 25,692x + 48,39$ | $y = -0,6998x^3 + 10,413x^2 - 32,127x + 52,603$ |
| 6 | Fe | $y = -7,9583x^3 + 14,196x^2 + 16,489x + 44,488$ | $y = -3,7886x^3 + 34,997x^2 - 75,378x + 66,232$ |
| 7 | V | $y = 0,0277x^3 - 0,1546x^2 - 1,3636x + 50,395$ | $y = -0,0754x^3 + 1,3122x^2 - 7,1648x + 56,698$ |
| 8 | Si | $y = 37215x^3 - 12374x^2 + 721,02x + 54,574$ | $y = -27144x^3 + 6811,7x^2 + 8,3707x + 43,439$ |

Възможни са два случая.

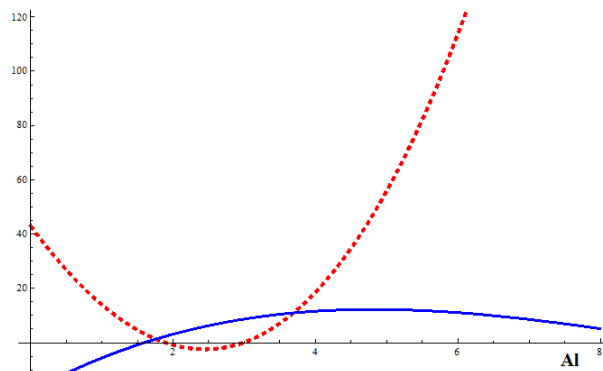
1) Задаване стойности на праговете на критериите, при които разглежданите n на брой системи неравенства нямат решение при всички отделни стойности

$\vec{x} = (x_1, \dots, x_n) \in R^n$ на променливите. В този случай се осъществява задаване на по-ниски стойности на единия или едновременно и на двата критерия.

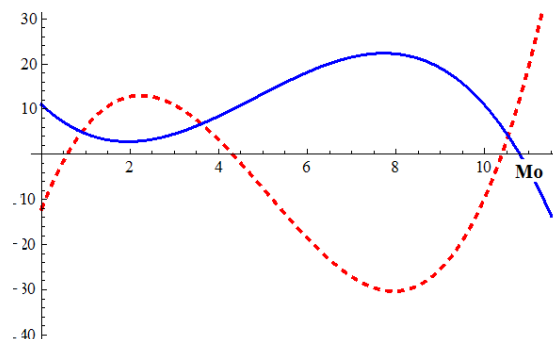
2) Концентрационният интервал на отделните легиращи елементи е много широк. В този случай се търсят стойности на праговете, които едновременно ограничават всички резултати.

4. РЕЗУЛТАТИ

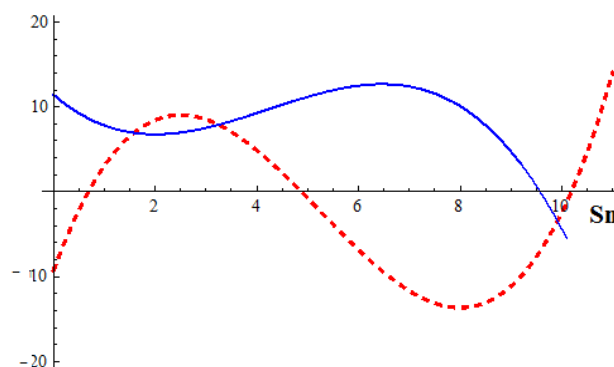
В табл. 2 са представени моделите, изведени за нормирани стойности на изследваните величини, а във фиг. 1. до фиг. 8 са представени графични интерпретации на различните легиращи елемента при две конкретни бази $R_{p02} \geq 43.27\%$ и $E \geq 50\%$



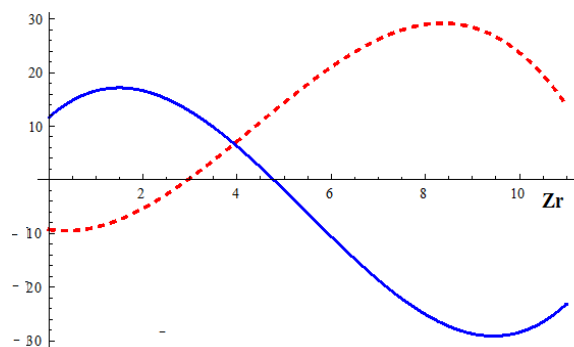
Фиг 1. Интервали на решение за Al при зададените бази на изменение на изследваните величини: $[1.59653 \leq Al \leq 1.895]$ $[2.981 \leq Al \leq 8]$



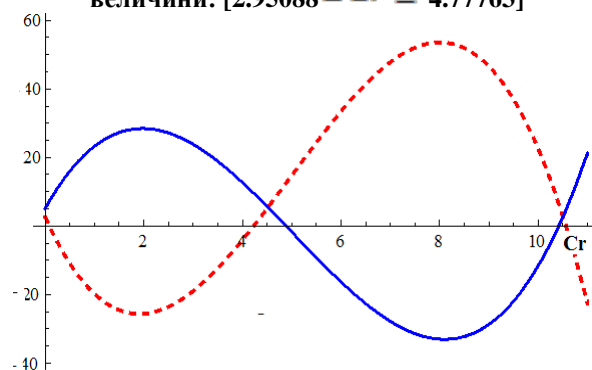
Фиг 2. Интервали на решение за Mo при зададените бази на изменение на изследваните величини: $[0.581706 \leq Mo \leq 4.31506]$ $[10.388 \leq Mo \leq 10.7925]$



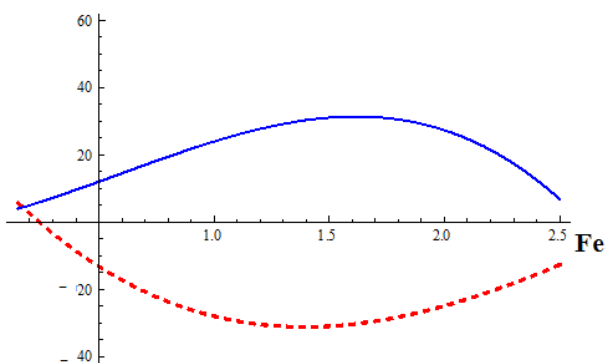
Фиг 3. Интервал на решение за Sn при зададените бази на изменение на изследваните величини: $[0.683204 \leq Sn \leq 4.87263]$



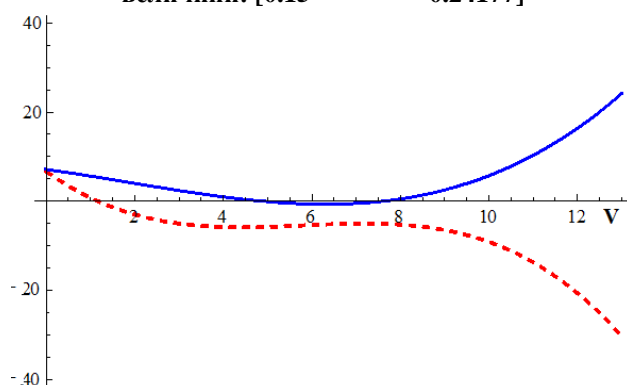
Фиг 4. Интервал на решение за Zr при зададените бази на изменение на изследваните величини: $[2.95088 \leq Zr \leq 4.77763]$



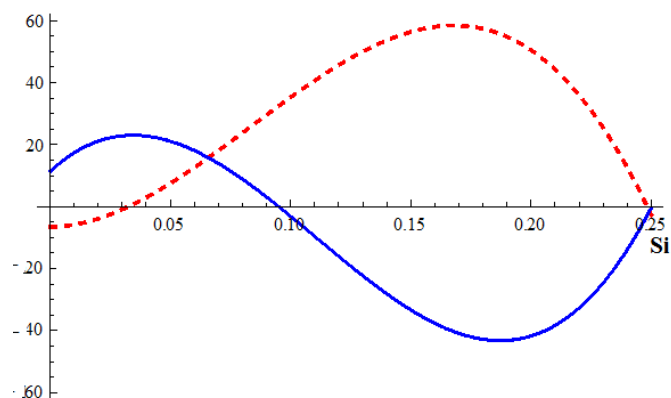
Фиг 5. Интервали на решение за Cr при зададените бази на изменение на изследваните величини: $[0 \leq Cr \leq 0.0832]$ 3], $[4.228 \leq Cr \leq 4.88484]$ или $[10.42 \leq Cr \leq 10.5651]$



Фиг 6. Интервал на решение за Fe при зададените бази на изменение на изследваните величини: $[0.15 \leq Fe \leq 0.24177]$



Фиг 7. Интервал на решение за V при зададените бази на изменение на изследваните величини: $[0.15 \leq V \leq 1.678]$



**Фиг 8. Интервал на решение за Si при зададените бази на изменение на изследваните величини:
[$0.0325709 \leq Si \leq 0.0950526$]**

На ординатните оси на всичките осем графики са дадени превишенията на изследваните величини ($Rp_{0.2}$ – плътна линия, E – пунктирна линия) над съответните бази в проценти.

При фиксирани стойности – base1=43.27 (%) за $Rp_{0.2}$ и base2=50 (%) за E показаните на Фиг.1 до Фиг.8 интервали математически се определят като $\{x_i : f_i(x_i) \geq base1\} \cap \{x_i : g_i(x_i) \geq base2\}$ за $i = 1, 2, \dots, 8$, където $f_i(x_i)$ и $g_i(x_i)$ са съответно моделите за $Rp_{0.2}$ и E , дадени в Табл.2.

5. ИЗВОДИ

Предложеният подход може да се използва за предвиждане на интервалите на отделните компоненти при осигуряване на желаните нива на механичните свойства с точност в границите на масива от данни. Предложението дава реална възможност за значително намаляване на разходите и времето за предсказване на химични концентрации и множество свойства на титановите сплави, така че новите сплави ще имат свойства в предварително посочен интервал. Тази концепция за проектиране на състава на сплавите е в състояние да осигури граничен праг от стойности на двата критерия, над който не е възможно да се определи оптимален състав.

Литература:

- [1.] Tontchev N. Materials Science, Effective solutions and Technological variants, 2014/3/3, LAMBERT Academic Publishing
- [2.] Campbell C.E., G.B. Olson, "System design of high performance stainless steels I, Conceptual and computational design", Journal of Computer-Aided Materials Design 2001, 7:145-17
- [3.] Vitos L., P.A. Korzhavyi and B. Johansson, "Stainless steel optimization from quantum mechanical calculations", Nature Materials 2003, 2:25-28
- [4.] Maier M.F., K. Stowe and S. Sieg, "Combinatorial and high-throughput materials science", Angewandte Chemie-International Edition 2007, 46:6016-6067
- [5.] Fischer C.C, K.J. Tibbetts, D. Morgan and G. Cedar, "Predicting crystal structure by merging data mining with quantum mechanics", Nature Materials 2006, 5:641-646
- [6.] Borst R. de, "Challenges in computational materials science: Multiple scales, multi-physics and evolving discontinuities", Computational Materials Science 2008, 43:1-15

[7.] Tontchev N., L. Kirilov , Two Approaches for Solving Multiple Criteria Decision Making (MCDM) Problems with an Illustrative Example, PROBLEMS OF ENGINEERING, CYBERNETICS AND ROBOTICS, 58, 2007, 53-63 2007

[8.] Fujii, MacKay, D. J. C. and Bhadeshia, H. K. D. H., "Bayesian neural Network Analysis of Fatigue Crack Growth Rate in Nickel-Base Superalloys", ISIJ International, Vol. 36, 1996, pp. 1373-1382.

[9.] Jones, J. , MacKay, D. J. C., "Neural Network Modeling of the Mechanical Properties of Nickel Base Superalloys", 8th Int. Symposium on Superalloys, Seven Springs, PA, eds. R. D. Kissinger et al., published by TMS, 1996, pp. 417-424.

[10.] Vuchkov, I., & Stoyanov, S. (1980). Mathematical modeling and optimization of process units. Sofia: Engineering, (In Bulgarian).

[11.] Ilyin AA Titanium alloys. The composition, structure and properties. Handbook / A.A.Ilin, B.A.Kolachev, I.S.Polkin - M.: VILS-MATI, 2009, 520 pp. (in Russian)

[12.] 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)

BI-CRITERIA OPTIMIZATION APPROACH APPLIED IN METALLURGY TO SEARCH AN INTERVAL OF PARAMETERS TO SATISFY A PRIORI DEFINED REQUIREMENTS FOR THE VARIABLES

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

*Todor Kableshkov University of Transport,
158 Geo Milev Street, Sofia,
BULGARIA*

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

Abstract: *This paper presents an approach and validated techniques for the compromise solutions to meet any specific requirements on the properties of the alloys. For examples of specific properties when studied titanium alloys indicating the possible ranges of alloying elements. Conceptually, this approach is applicable to the design and optimization of random alloys, since in practice it is independent of database. The approach extends our previous studies and covers additional objectives.*