

## МОДЕЛИРАНЕ НА СВОЙСТВАТА И МНОГОКРИТЕРИАЛНА ОПТИМИЗАЦИЯ НА ХИМИЧЕСКИЯ СЪСТАВ НА МАГНЕЗИЕВИ СПЛАВИ

Николай Тончев<sup>1</sup>, Мартин Иванов<sup>2</sup>, Иванка Пенчева<sup>1</sup>, Антония Тончева<sup>3</sup>  
[tontchev@vtu.bg](mailto:tontchev@vtu.bg), [martinivanov@abv.bg](mailto:martinivanov@abv.bg), [ivasp@abv.bg](mailto:ivasp@abv.bg), [atoncheva9@gmail.com](mailto:atoncheva9@gmail.com)

<sup>1</sup> Висше Транспортно Училище „Тодор Каблешков“ - София

<sup>2</sup> Нов Български Университет, <sup>3</sup> Софийски Университет „Св. Климент Охридски“  
БЪЛГАРИЯ

**Ключови думи:** Моделиране на свойства, многокритериална оптимизация, магнезиеви сплави.

**Резюме:** С недостига на енергия и замърсяването на околната среда се изисква все повече внедряване на лежиматериали. По тази причина обекта на изследването в тази публикация са свръхлеките Mg-Li-Al сплави, които намират широко приложение в космическите изследвания, отбраната, автомобилостроенето, поради тяхната ниска плътност, висока специфична якост и висока специфична твърдост. В изследването се прилагат стандартни процедури за определяне на Парето фронта, необходим за експертна оценка на влиянието на елементите от състава на сплавта върху контролираните механични свойства – якост на опън и относително удължение. Изведени са невронни модели, описващи механичните характеристики от количеството на алуминия и лития със значение за експлоатационните свойства на изделието. Чрез приложението подход е възможно да се определи състав, осигуряващ относително оптимални стойности на изследваните индикатори на качеството.

### 1. УВОД

Решаването на съвременни технически задачи се свързва с отстраняване на дадено техническо или физично противоречие на факторите, описващи проблема. В областта на материалознанието това е противоречието между якост –  $R_m$  и относително удължение –  $A$ . Множеството от техни алтернативи се получават чрез съответно легиране или термично обработване. Така се формира задача, в която входните параметри са състава, определен от количеството на конкретния елемент и параметрите на режима на обработване. Задачата от този вид е многокритериална и всеки критерий се определя от съответна негова целева функция. За решаването на тази задача се търсят подходи, улесняващи лицето вземащо решение ЛВР /Decision Maker/ в анализите, които той/тя правят. Разработените подходи използват различни числени стратегии за определянето на съответните решения. Един от подходите [1] е определянето на фронта на Парето на целевите функции. Този подход дава устойчиви решения при малък брой изследвани целеви функции. Негов недостатък е големият брой решения, които лицето вземащо решение ЛВР в последствие трябва да оценява.

Различно получените решения са свързани с различен определен ефект на постигнати ползи. За да се приложи многокритериалния подход, за анализ на избрания индикатор на качеството, е необходимо да се изведат модели за изследваните величини при проведен експеримент.

В настоящото изследване се използва експеримент, проведен във връзка с националната програма за високи технологии изследвания и развитие – Програма – 863 на Китай през 2009 – проект AA03Z525 на фонда за науката и технологиите на град Далиан и вътрешен проект J21DW003/2009 .

В табл. 1 са определени границите, в които варира процентното съдържание на отделните основни елементи на магнезиевата сплав, а в табл. 2 е посочен използваните данни за връзката между състав и свойства.

**Таблица 1. Диапазон на изменение на управляващите параметри.**

| Фактори                  | Нива на вариране на управляващите фактори |           |         |
|--------------------------|---|-----------|---------|
|                          | Код [-1]                                  | Код [ 0 ] | Код [1] |
| X <sub>1</sub> (Mg),[%]  | 77,93                                     | 88,03     | 98,14   |
| X <sub>2</sub> (Li) ,[%] | 0,55                                      | 9,46      | 18,37   |
| X <sub>3</sub> (Al),[%]  | 0,78                                      | 3,58      | 6,39    |

**Таблица 2. Връзка между състав и свойства от използваната база данни.**

| №   | Сплави      | X <sub>1</sub> /Li/ | X <sub>2</sub> /Al/ | Rm [MPa] | A[%]  |
|-----|-------------|---------------------|---------------------|----------|-------|
| 1.  | Mg-1Li-1Al  | -0.981              | -0.872              | 160.31   | 11.98 |
| 2.  | Mg-1Li-3Al  | -1.00               | -0.23               | 179.37   | 10.65 |
| 3.  | Mg-1Li-5Al  | -0.993              | 0.333               | 191.78   | 12.05 |
| 4.  | Mg-1Li-7Al  | -1.00               | 0.986               | 170.22   | 6.65  |
| 5.  | Mg-3Li-1Al  | -0.804              | -1.00               | 138.31   | 10.63 |
| 6.  | Mg-3Li-3Al  | -0.84               | -0.348              | 191.7    | 15.25 |
| 7.  | Mg-3Li-5Al  | -0.818              | 0.266               | 227.07   | 15.5  |
| 8.  | Mg-3Li-7Al  | -0.825              | 0.847               | 203.82   | 6.70  |
| 9.  | Mg-5Li-1Al  | -0.360              | -0.914              | 147.53   | 21.8  |
| 10. | Mg-5Li-3Al  | -0.364              | -0.319              | 160.14   | 11.9  |
| 11. | Mg-5Li-5Al  | -0.376              | 0.287               | 199.17   | 8.0   |
| 12. | Mg-5Li-7Al  | -0.513              | 1.00                | 220.03   | 6.15  |
| 13. | Mg-7Li-1Al  | -0.073              | -0.943              | 171.18   | 24.7  |
| 14. | Mg-7Li-3Al  | -0.107              | -0.373              | 199.84   | 19.93 |
| 15. | Mg-7Li-5Al  | -0.259              | 0.216               | 222.93   | 10.1  |
| 16. | Mg-7Li-7Al  | -0.211              | 0.797               | 210.99   | 4.45  |
| 17. | Mg-9Li-1Al  | 0.211               | -0.882              | 175.96   | 22.3  |
| 18. | Mg-9Li-3Al  | 0.121               | 0.348               | 182.33   | 21.2  |
| 19. | Mg-9Li-5Al  | 0.099               | 0.184               | 195.06   | 5.7   |
| 20. | Mg-9Li-7Al  | 0.055               | 0.847               | 225.32   | 9.56  |
| 21. | Mg-11Li-1Al | 0.323               | -0.954              | 189.49   | 13.45 |
| 22. | Mg-11Li-3Al | 0.416               | -0.422              | 201.43   | 14.55 |
| 23. | Mg-11Li-5Al | 0.38                | 0.234               | 192.68   | 5.4   |
| 24. | Mg-11Li-7Al | 0.397               | 0.811               | 180.33   | 4.05  |

|     |             |       |        |        |       |
|-----|-------------|-------|--------|--------|-------|
| 25. | Mg-13Li-1Al | 0.724 | -0.986 | 177.02 | 11.5  |
| 26. | Mg-13Li-3Al | 0.627 | -0.387 | 217.09 | 8.57  |
| 27. | Mg-13Li-5Al | 0.813 | 0.201  | 236.47 | 2.50  |
| 28. | Mg-13Li-7Al | 0.773 | 0.761  | 224.13 | 1.00  |
| 29. | Mg-15Li-1Al | 1.00  | -0.936 | 123.81 | 26.10 |
| 30. | Mg-15Li-7Al | 0.478 | 0.971  | 124.78 | 2.23  |

## 2. МЕТОДИКА ЗА ПРОВЕЖДАНЕ НА ИЗСЛЕДВАНЕТО

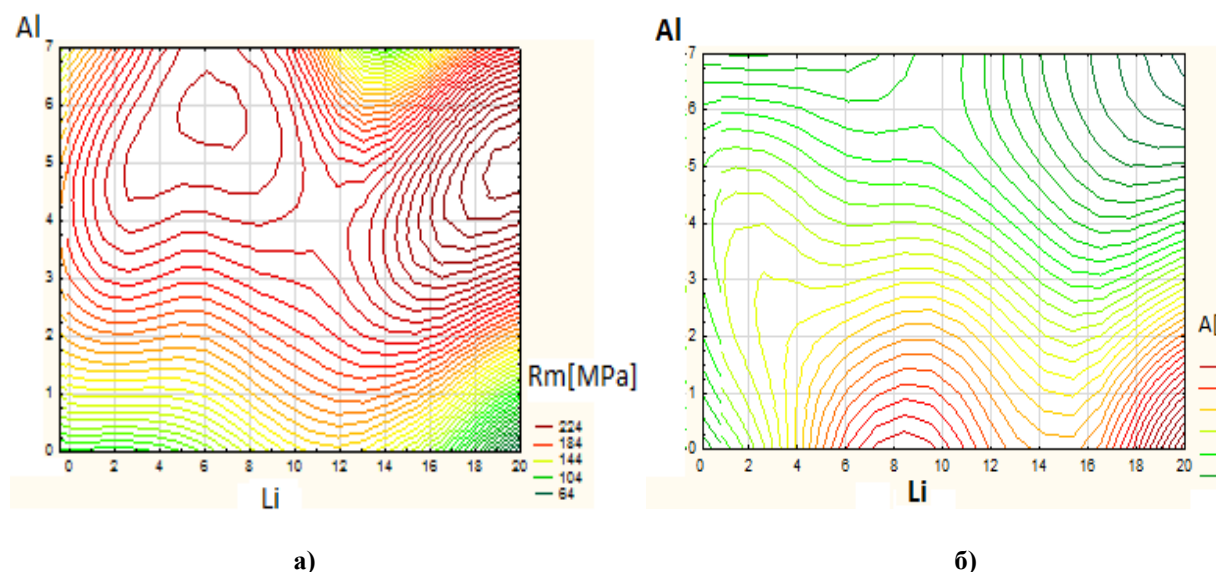
Методиката за провеждане на изследването се състои от следните етапи:

- Предварителен статистически анализ на данните от изследването с визуализация на зависимостите между наблюдаваните величини. Това включва определяне на базовите (описателни) статистически характеристики, наличието на корелация на параметрите на експерименталните изследвания и построяване на двумерни контурни диаграми между независимите и зависимите величини в изследването.
- Апроксимация на зависимостите между участващите в химическия състав на сплавта химически елементи и механичните ѝ характеристики с помощта на невронни модели.
- Реализация на софтуерен модел за съставяне на фронт на Парето за величините якост на опън -  $R_m$  и относително удължение -  $A$ . Същият се съставя въз основа на резултатите, получени на предишните стъпки на изследването.

## 3. СТАТИСТИЧЕСКИ АНАЛИЗ НА ДАННИТЕ И ВИЗУАЛИЗАЦИЯ

Най-съществената задача на този етап бе да се установи възможност за намиране на евентуална връзка на независимите параметри и зависимите характеристики в експерименталното изследване. Статистическият анализ позволи да бъдат определени некорелираните входни параметри от експеримента, които могат да бъдат използвани за построяването на регресионен модел – това е процентното съдържание на елементите Li и Al в състава на сплавта.

Визуализацията на представените първични експериментални данни илюстрира наличната информация за изменението на механичните параметри на сплавта от химическия ѝ състав. На фиг. 1а) е показана двумерната контурна диаграма на зависимостта на  $R_m$  от процентното съдържание на елементите Li и Al в експеримента.



Фиг. 1. Двумерни диаграми на зависимостта на якостта на опън - а) и относителното удължение - б) от химическия състав на процентното отношение между Li и Al.

Визуализацията на зависимостта на якост на опън и относителното удължение от процентното съдържание на елементите Li и Al, като контурна диаграма, показана на фиг. 1. Апроксимацията на зависимостите е извършена също по метода Distance Weighted Least Squares.

### Апроксимация с невронни модели

Апроксимацията на зависимостите на Rm и A по стойностите на процентния състав на елементите Li и Al с невронни модели е необходима с оглед включването им в софтуерен модел за съставяне на фронт на Парето. Невронните модели са от регресионен тип. Те имат структурата на трислоен перцептрон с входове стойностите на състава на легиращите елементи и с изходи апроксимираните стойности на механичните характеристики якост на опън Rm и относително удължение A. Оценката на качеството на апроксимационните модели става въз основа коефициента на регресия R между фактически наблюдаваните експериментални и моделираните стойности на резултантните величини. Данните за структурата на невронните модели и оценките на качеството им са показани в табл. 3 и табл. 4. Моделите са съставени с помощта на професионален пакет за статистически изследвания Statistica v.10 на корпорацията StatSoft и са получени под формата на изходен програмен код на езика C, който е инкорпориран директно в софтуерния модел на следващия етап.

**Таблица 3. Характеристики на невронния модел, апроксимиращ зависимостта на якостта на опън Rm от процентния състав на Li и Al.**

| Вид на Модела | Коеф. R обучение | Коеф. R Тестване | Коеф. R валидация | Функция на грешката | Активационна функция - скрит слой | Активационна функция - изход |
|---------------|------------------|------------------|-------------------|---------------------|-----------------------------------|------------------------------|
| MLP 2-6-1     | 0,907289         | 0,860434         | 0,683768          | SOS                 | Exponential                       | Logistic                     |

**Таблица 4. Характеристики на невронния модел, апроксимиращ зависимостта на относителното удължение A от процентния състав на Li и Al.**

| Вид на Модела | Коеф. R обучение | Коеф. R Тестване | Коеф. R валидация | Функция на грешката | Активационна функция - скрит слой | Активационна функция - изход |
|---------------|------------------|------------------|-------------------|---------------------|-----------------------------------|------------------------------|
| MLP 2-6-1     | 0,923909         | 0,938022         | 0,929628          | SOS                 | Exponential                       | Logistic                     |

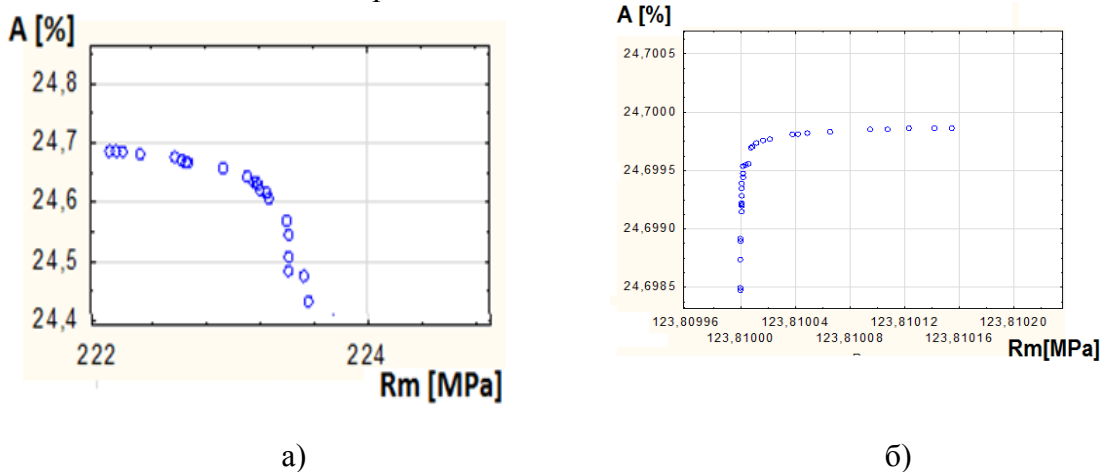
### Съставяне на фронт на Парето

Софтуерният модел съставя фронт на Парето за по два критерия. Моделът е разработен по схемата на алгоритъма NSGA-II [2], в основата на който е залегнала процедурата за бързата недоминираща сортировка на точките, образуващи фронта (fast non-dominated sort). Реализиран е програмно като приложение на Java, основава се на вариант на генетичен оптимизационен алгоритъм и включва следните основни модули:

- Инициализация – генериране на начална популация от точки в дефиниционната област на независимите променливи (процентния състав за Li и Al) по случаен начин;
- Изчисление на апроксимираните стойности на величините Rm и A чрез невронните модели;
- Приложение на процедурата fast non-dominated sort за съставяне на потенциално недоминирани точки от фронта на Парето;
- Процедура за актуализиране на състава на популацията, основаваща се на техниките на кръстосване и мутация на хромозомите, представящи точки от дефиниционната област на задачата.

Оптимизационният алгоритъм е итеративен, а реализацията му показва добра сходимост към крайното решение.

Резултатът от съставянето на фронта на Парето в задачата за съвместно максимизиране на стойностите на величините  $R_m$  и  $A_e$  изобразен на фиг. 2 а) . На фиг. 2 б) е изобразен фронтът на Парето, отговарящ на задачата за минимизиране на стойността на  $R_m$  и максимизиране на тази на  $A$ . И в двата случая фронтът е най-силно изразен в сравнително тесен диапазон на стойностите на якостта на опън  $R_m$  и относителното удължение  $A$ , което се обяснява с наблюдавания диапазон, в който се изменят на изходните експериментални стойности за химическия състав на сплавта.



Фиг.2 Парето фронтове на изследваните якост на опън и относително удължение

**4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ.** Приложен е многокритериален подход за експертна оценка на влиянието на елементите от състава на сплавта върху предварително избрани индикатори на качеството с цел подобряване механичните свойства на изделията. Изведени са невронни модели, описващи механичните характеристики от количеството на алуминия и лития с значение за експлоатационните свойства на изделието. Чрез приложението подход е възможно да се определи състав, осигуряващ относително най-добри значения на стойностите на селектираните механични показатели. С нови средства са потвърдени известни на науката и практиката факти.

#### ЛИТЕРАТУРА:

- [1] Tontchev N. Materials Science, Effective solutions and Technological variants, 2014/3/3, LAMBERT Academic Publishing
- [2] Kalyanmoy Deb, Associate Member, IEEE, Amrit Pratap, Sameer Agarwal, and T. Meyarivan,  
A Fast and Elitist Multiobjective Genetic Algorithm: NSGA-II, IEEE, Transactions On Evolutionary Computation, Vol. 6, No. 2, April 2002.
- [3] Rajan K., "Materials Informatics Part I: A Diversity of Issues", JOM 2008, 60:50-50.
- [4] Liu Z. K., L. Q. Chen and K. Rajan, "Linking length scales via materials informatics", JOM 2006, 58:42-50.

# MODELLING OF PROPERTIES AND MULTI-CRITERIA OPTIMIZATION OF THE CHEMICAL COMPOSITION OF MAGNESIUM ALLOYS

Nikolay Tonchev, Martin Ivanov, Antonia Tontcheva  
tonchev@gmail.com, martinivanov@abv.bg, atoncheva9@gmail.com

<sup>1</sup> Todor Kableshkov University of Transport Sofia,

<sup>2</sup> New Bulgarian University - Sofia

<sup>3</sup> Sofia University "St. Kliment Ohridski "

BULGARIA

**Key words:** Materials Science, Modelling of properties, multi-criteria optimization, magnesium alloys.

**Abstract:** A multi-criteria approach is applied for an expert assessment of the impact of the elements in the alloy composition on a priori chosen quality indicators to improve the mechanical properties of the products. Neural models are derived describing the mechanical characteristics of the quantity of aluminum and lithium related to the exploitation properties of the product. Using the applied approach it is possible to define a composition providing relatively best values of the selected mechanical indicators. Well known facts in science and in practice are confirmed with new tools.