

一种设计高强韧性钢材的新方法

张国英 刘贵立

(沈阳工业大学 沈阳 110023)

曾梅光 钱存富 耿平

(东北大学 沈阳 110006)

文 摘 在实验数据的基础上,利用人工神经网络建立高 Co - Ni 二次硬化钢的力学性能与合金成分及热处理温度对应关系的模型。提出将五个材料力学性能指标及部分合金成分作为网络的输入,其它合金成分和热处理温度作为网络的输出,根据要求的力学性能设计材料的合金成分含量及热处理条件,获得了满意的结果,为高性能材料设计提供了一定的理论辅助手段。

关键词 高 Co - Ni 二次硬化钢,人工神经网络,材料设计

A New Method for Designing High Strength and High Toughness Steel

Zhang Guoying Liu Guili

(Shenyang Polytechnic University Shenyang 110023)

Zeng Meiguang Qian Cunfu Geng Ping

(Northeastern University Shenyang 110006)

Abstract On the basis of experimental data, artificial neural network is used to construct the model of relationship between mechanical properties and alloy elements as well as heating treatment temperature for high Co - Ni secondary hardening steel design. Five mechanical properties of steel and partial alloy elements are taken as inputs of the network, other alloy elements and heating treatment temperature are taken as outputs of network. According to our requirement of mechanical properties, the content of alloy element and the condition of heating treatment can be designed and a good result can be obtained. The artificial neural network may provide a theoretical assistant method for design of high performance material.

Key words Secondary hardening steel, Artificial neural network, Design of material

引言

随着宇航工业的发展,对材料力学性能提出了更高的要求,超高强度高韧钢的研制和应用不断取得新的进展。几十年来,国内外先后发展了低合金,中合金和高合金超高强度高韧钢,典型代表是 18 Ni 马氏体时效钢和高 Co - Ni 二次硬化钢^[1],高 Co - Ni 二次硬化钢是在淬火,回火二次硬化的基础上,利用

Ni、Co 含量调节韧性发展起来的,它综合了低合金超高强度钢和马氏体时效钢的优点,具有良好的强韧性配合^[2]。

人工神经网络是近年发展起来的模拟人脑生物过程的具有人工智能的系统^[3],目前在材料设计方面的应用已取得了一定的进展^[4]。它无需人们预先给定公式的形式,而是以实验数据为基础,经过有限

收稿日期:1999 - 02 - 09;修回日期:2000 - 01 - 07

张国英,1965 年出生,博士研究生,主要从事材料物理及半导体物理方面的研究工作

次迭代计算而获得的一个反映实验数据内在规律的数学模型,因此它特别适合于研究复杂非线性系统的特性。本文应用人工神经网络研究了高 Co - Ni 二次硬化钢,在控制 Nb、Ti、C 含量的情况下对材料的其它合金成分及淬火、时效温度进行直接设计。

1 人工神经网络建立模型

采用反向传播算法(BP)建模^[5],见图 1。网络结构为 8 × 14 × 6,其中网络的 8 个输入是高 Co - Ni 二次硬化钢的五个力学性能指标和部分合金成分(Nb, Ti, C),分别用 $Z_1 \sim Z_8$ 表示,六个输出分别是合金成分 Ni、Co、Cr、Mo 及淬火、时效温度,用 $O_1 \sim O_6$ 表示。中间隐层上的 14 个神经元输出为 Y_j 。

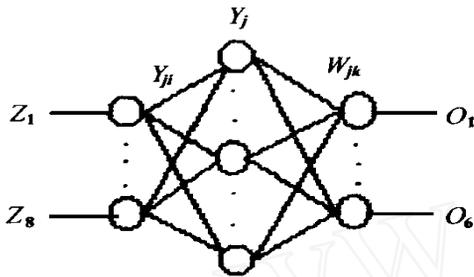


图 1 BP 网络结构

Fig. 1 The structure of BP network

$$Y_j = f(\text{net}_j) \quad (1)$$

$$\text{net}_j = \sum_{i=1}^9 V_{ji} Z_i \quad j = 1, 2, \dots, 14 \quad (2)$$

$$O_k = f(\text{net}_k) \quad (3)$$

$$\text{net}_k = \sum_{j=1}^{15} W_{jk} Y_j \quad k = 1, 2, \dots, 6 \quad (4)$$

$$f(x) = [1 - \exp(-x)] / [1 + \exp(x)] \quad (5)$$

这里 net_j 、 net_k 分别为隐层第 j 个神经元和输出层第 k 个神经元的输入, V_{ji} 和 W_{jk} 分别表示输入层与隐层以及隐层与输出层之间的权值。训练一个神经网络就是通过调整权值以实现复杂非线性对象的建模和估计,训练网络的指标函数取为

$$E = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^6 \sum_{n=1}^P (D_{nk} - O_{nk})^2 \quad (6)$$

其中 D_{nk} 表示第 n 个学习样本的第 k 个分量,通常称之为导师信号, O_{nk} 表示相应网络的实际输出值, P 为训练样本数。第 $t+1$ 次迭代权的修正为

$$W_{jk}(t+1) = W_{jk}(t) + \eta Y_j + \alpha [W_{jk}(t) - W_{jk}(t-1)] \quad (7)$$

$$V_{ji}(t+1) = V_{ji}(t) + \eta Z_i + \alpha [V_{ji}(t) - V_{ji}(t-1)] \quad (8)$$

这里 η 是学习率, α 是动量项系数, η 、 α 是学

习信号,其表达式为

$$\eta_k = (D_k - O_k) f'(\text{net}_k) \quad (9)$$

$$\alpha_j = \sum_{k=1}^6 W_{jk} \eta_k f'(\text{net}_j) \quad (10)$$

训练网络的样本取自北京钢铁研究总院的实验数据及部分国内外有关资料共 41 个,其中 39 个用于训练网络,2 个用于检验网络的预测能力。为保证收敛,我们首先对样本数据进行归一化处理,使所有数据在 $[0 \sim 1]$ 之间的网络空间变化。具体做法是:令某组数据中最大值为 b , 最小值为 a , 则归一化前该组数据中的数据 X 在归一化后的值为

$$c = (X - a) / (b - a) \quad (11)$$

显然,网络的输出结果可经过反归一化后获得其在原物理空间的数值

$$X = a + c \times (b - a) \quad (12)$$

在训练网络过程中,为了加快收敛,我们采用了变步长的方法。初始学习率 $\eta = 0.6$, 动量项系数 $\alpha = 0.5$, 当网络训练过程出现振荡时减小学习率和动量项系数,经变步长训练 10 000 次,系统学习误差 $E = 0.001107$, 结果见表 1。文中列出 39 个训练样本及 2 个(带*)检测样本。可见网络输出与实验结果非常接近,这表明我们已经正确建立了网络的输入输出关系。

2 材料合金成分设计及热处理温度确定

为了获得具备优良力学性能的材料,必须合理设计材料的合金成分及相应的热处理温度,高 Co - Ni 二次硬化钢是一个多元合金系统,其力学性能受合金成分及热处理条件的综合影响,因此其成分设计及热处理制度的确定都必须经过反复实验才能达到预期的目的,为了降低消耗,减少实验次数,提高效率,人们的目光转向了理论辅助的材料设计和预测。人工神经网络是近年发展起来的模拟人脑生物过程的具有人工智能的系统,目前在材料设计方面的应用已取得了一定的进展。

人们通常将材料的合金成分及热处理温度作为网络的输入,材料的力学性能作为网络的输出,来建立反映实验数据内在规律的数学模型,利用各种优化方法实现材料的设计。然而,无论应用哪种方法,如遗传算法、模拟退火算法,都需要计算机进行多次迭代运算,计算量很大,并且容易陷入局部极值区域,往往得不到最优解,只能获得一个次优解。材料的力学性能指标较多,要获得综合性能指标优良的材料,使优化算法非常复杂。

表 1 网络学习及检验样本
Tab. 1 Learning and testing samples of neural network

| 序号 | 网络输入变量 | | | | | | | | | | 网络输出值 | | | | | | | | | |
|----|------------------------|--------------------|----------------------------------|-------------|-----------|-------|--------|------|-------|-------|-------|------|-----------|-----------|-------|-------|------|------|-----------|-----------|
| | $\sigma_{0.2}$ /MPa | σ_b /MPa | K_{IC} MPa·m ^{1/2} | δ /% | ψ /% | Nb/% | Tv/% | C/% | Ni/% | Co/% | Cr/% | Mo/% | 时效 /°C | 淬火 /°C | Ni/% | Co/% | Cr/% | Mo/% | 时效 /°C | 淬火 /°C |
| 1 | 1 852 | 2 029 | 79.7 | 12.5 | 60.7 | 0.000 | 0.009 | 0.17 | 11.36 | 15.37 | 2.00 | 1.60 | 480 | 840 | 11.38 | 15.46 | 2.00 | 1.58 | 480 | 839 |
| 2 | 1 786 | 1 886 | 105.2 | 12.0 | 64.0 | 0.000 | 0.009 | 0.17 | 11.36 | 15.37 | 2.00 | 1.60 | 495 | 840 | 11.30 | 15.42 | 2.01 | 1.59 | 495 | 839 |
| 3 | 1 560 | 1 586 | 135.3 | 13.1 | 67.4 | 0.000 | 0.009 | 0.17 | 11.36 | 15.37 | 2.00 | 1.60 | 510 | 840 | 11.28 | 15.56 | 1.99 | 1.59 | 508 | 840 |
| 4 | 1 772 | 1 842 | 119.4 | 11.3 | 61.8 | 0.000 | 0.011 | 0.16 | 11.19 | 15.46 | 2.51 | 1.65 | 495 | 840 | 11.23 | 15.38 | 2.54 | 1.63 | 495 | 839 |
| 5 | 1 601 | 1 616 | 153.4 | 13.2 | 62.0 | 0.000 | 0.011 | 0.16 | 11.19 | 15.46 | 2.51 | 1.65 | 510 | 840 | 11.22 | 15.49 | 2.49 | 1.66 | 510 | 839 |
| 6 | 1 742 | 1 891 | 118.0 | 12.1 | 62.9 | 0.000 | 0.012 | 0.17 | 11.42 | 15.30 | 2.96 | 1.60 | 480 | 840 | 11.40 | 15.20 | 2.87 | 1.60 | 479 | 840 |
| 7 | 1 496 | 1 514 | 187.0 | 13.9 | 68.2 | 0.000 | 0.012 | 0.17 | 11.42 | 15.30 | 2.96 | 1.60 | 510 | 840 | 11.33 | 15.13 | 2.95 | 1.59 | 509 | 840 |
| 8 | 1 671 | 1 808 | 98.9 | 13.8 | 64.9 | 0.000 | 0.013 | 0.18 | 9.27 | 13.49 | 2.64 | 1.39 | 495 | 840 | 9.22 | 13.53 | 2.64 | 1.38 | 494 | 839 |
| 9 | 1 539 | 1 584 | 160.4 | 13.9 | 68.7 | 0.000 | 0.013 | 0.18 | 9.27 | 13.49 | 2.64 | 1.39 | 510 | 840 | 9.27 | 13.49 | 2.63 | 1.38 | 510 | 840 |
| 10 | 1 483 | 1 712 | 146.6 | 14.4 | 66.0 | 0.033 | 0.012 | 0.22 | 9.58 | 7.74 | 2.04 | 1.07 | 480 | 840 | 9.58 | 7.68 | 2.03 | 1.07 | 479 | 840 |
| 11 | 1 492 | 1 676 | 166.4 | 15.9 | 68.3 | 0.033 | 0.012 | 0.22 | 9.58 | 7.74 | 2.04 | 1.07 | 495 | 840 | 9.56 | 7.84 | 2.04 | 1.08 | 495 | 839 |
| 12 | 1 824 | 1 987 | 51.1 | 8.9 | 45.9 | 0.0 | 0.012 | 0.20 | 9.47 | 15.52 | 0.74 | 2.09 | 480 | 840 | 9.46 | 15.41 | 0.73 | 2.20 | 479 | 839 |
| 13 | 1 932 | 2 047 | 57.9 | 10.3 | 51.2 | 0.0 | 0.012 | 0.20 | 9.47 | 15.52 | 0.74 | 2.09 | 495 | 840 | 9.46 | 15.60 | 0.73 | 2.20 | 495 | 840 |
| 14 | 1 532 | 1 728 | 152.4 | 16.2 | 66.0 | 0.03 | 0.016 | 0.21 | 9.48 | 9.51 | 1.95 | 1.02 | 480 | 840 | 9.46 | 9.50 | 1.95 | 1.03 | 480 | 839 |
| 15 | 1 674 | 1 905 | 86.2 | 13.1 | 65.6 | 0.00 | 0.013 | 0.16 | 9.77 | 13.75 | 2.01 | 1.1 | 480 | 830 | 9.77 | 13.68 | 2.01 | 1.11 | 479 | 829 |
| 16 | 1 505 | 1 584 | 175.2 | 15.9 | 69.1 | 0.0 | 0.013 | 0.16 | 11.36 | 13.25 | 2.97 | 1.3 | 510 | 830 | 11.33 | 13.17 | 2.96 | 1.31 | 479 | 856 |
| 17 | 1 775 | 2 034 | 75.8 | 13.2 | 58.9 | 0.0 | 0.012 | 0.21 | 11.36 | 13.25 | 2.97 | 1.3 | 495 | 857 | 11.44 | 13.28 | 2.96 | 1.30 | 495 | 856 |
| 18 | 1 677 | 1 783 | 134.8 | 13.3 | 64.8 | 0.0 | 0.012 | 0.21 | 11.36 | 13.25 | 2.97 | 1.3 | 510 | 857 | 11.34 | 13.34 | 3.00 | 1.29 | 510 | 840 |
| 19 | 1 491 | 1 531 | 166.8 | 17.3 | 69.4 | 0.0 | 0.012 | 0.21 | 9.78 | 8.20 | 2.35 | 1.41 | 480 | 840 | 9.75 | 8.19 | 2.34 | 1.41 | 479 | 840 |
| 20 | 1 675 | 1 873 | 90.2 | 14.2 | 61.3 | 0.034 | 0.0025 | 0.22 | 9.78 | 8.20 | 2.35 | 1.41 | 495 | 840 | 9.79 | 8.24 | 2.36 | 1.42 | 495 | 839 |
| 21 | 1 636 | 1 800 | 89.5 | 13.5 | 62.5 | 0.034 | 0.0025 | 0.22 | 9.78 | 8.20 | 2.35 | 1.41 | 510 | 840 | 9.76 | 8.25 | 2.35 | 1.40 | 509 | 840 |
| 22 | 1 644 | 1 765 | 103.0 | 14.7 | 65.4 | 0.034 | 0.0025 | 0.22 | 9.52 | 9.88 | 2.3 | 1.2 | 510 | 840 | 9.53 | 9.81 | 2.29 | 1.22 | 511 | 839 |
| 23 | 1 651 | 1 750 | 110.9 | 15.4 | 66.4 | 0.023 | 0.0001 | 0.22 | 9.44 | 9.53 | 1.86 | 1.02 | 480 | 840 | 9.43 | 9.52 | 1.85 | 1.03 | 479 | 839 |
| 24 | 1 540 | 1 756 | 116.9 | 15.7 | 64.3 | 0.03 | 0.004 | 0.21 | 9.54 | 9.70 | 1.91 | 1.03 | 480 | 840 | 9.54 | 9.65 | 1.90 | 1.03 | 480 | 839 |
| 25 | 1 605 | 1 813 | 139.9 | 16.0 | 63.0 | 0.032 | 0.018 | 0.24 | 9.48 | 9.60 | 1.95 | 0.99 | 490 | 840 | 9.50 | 9.60 | 1.95 | 0.99 | 490 | 839 |
| 26 | 1 650 | 1 830 | 105.0 | 13.0 | 60.0 | 0.029 | 0.047 | 0.27 | 9.68 | 9.94 | 1.98 | 1.08 | 470 | 880 | 9.68 | 9.93 | 1.98 | 1.06 | 470 | 878 |
| 27 | 1 600 | 1 840 | 123.0 | 14.0 | 66.0 | 0.023 | 0.02 | 0.24 | 9.68 | 9.94 | 1.98 | 1.08 | 480 | 880 | 9.68 | 9.98 | 1.98 | 1.08 | 479 | 880 |
| 28 | 1 610 | 1 800 | 131.0 | 14.0 | 67.0 | 0.023 | 0.02 | 0.24 | 9.68 | 9.94 | 1.98 | 1.08 | 490 | 880 | 9.66 | 9.97 | 1.93 | 1.09 | 488 | 880 |
| 29 | 1 590 | 1 780 | 155.0 | 14.0 | 68.0 | 0.023 | 0.02 | 0.24 | 9.68 | 9.94 | 1.98 | 1.08 | 500 | 880 | 9.65 | 9.87 | 1.96 | 1.08 | 499 | 880 |
| 30 | 1 590 | 1 730 | 175.0 | 13.0 | 68.0 | 0.023 | 0.02 | 0.24 | 9.68 | 9.94 | 1.98 | 1.08 | 510 | 880 | 9.66 | 9.93 | 1.97 | 1.08 | 509 | 879 |
| 31 | 1 540 | 1 640 | 173.0 | 14.0 | 69.0 | 0.023 | 0.02 | 0.24 | 9.68 | 9.94 | 1.98 | 1.08 | 485 | 880 | 9.66 | 9.93 | 1.97 | 1.08 | 486 | 880 |
| 32 | 1 630 | 1 800 | 151.0 | 14.0 | 68.0 | 0.023 | 0.02 | 0.24 | 9.68 | 9.94 | 1.98 | 1.08 | 490 | 880 | 9.69 | 9.94 | 2.00 | 1.08 | 486 | 880 |
| 33 | 1 650 | 1 800 | 116.0 | 13.0 | 61.0 | 0.029 | 0.047 | 0.27 | 9.48 | 9.60 | 1.95 | 0.99 | 500 | 840 | 9.45 | 9.61 | 1.94 | 1.00 | 499 | 839 |
| 34 | 1 900 | 2 021 | 31.7 | 11.7 | 60.1 | 0.000 | 0.011 | 0.16 | 11.19 | 15.46 | 2.51 | 1.65 | 480 | 840 | 11.20 | 15.45 | 2.49 | 1.65 | 479 | 839 |
| 35 | 1 623 | 1 698 | 163.4 | 13.3 | 69.5 | 0.000 | 0.012 | 0.17 | 11.42 | 15.30 | 2.96 | 1.60 | 495 | 840 | 11.46 | 15.27 | 2.98 | 1.61 | 495 | 839 |
| 36 | 1 709 | 1 932 | 61.1 | 13.2 | 62.1 | 0.000 | 0.013 | 0.18 | 9.27 | 13.49 | 2.64 | 1.39 | 480 | 840 | 9.27 | 13.56 | 2.65 | 1.38 | 480 | 839 |
| 37 | 1 469 | 1 582 | 177.7 | 16.4 | 69.6 | 0.033 | 0.012 | 0.22 | 9.58 | 7.74 | 2.04 | 1.07 | 510 | 840 | 9.59 | 7.69 | 2.03 | 1.05 | 510 | 840 |
| 38 | 1 624 | 1 797 | 113.4 | 14.1 | 67.3 | 0.0 | 0.013 | 0.16 | 9.77 | 13.75 | 2.01 | 1.1 | 495 | 830 | 9.77 | 13.70 | 1.99 | 1.09 | 494 | 830 |
| 39 | 1 687 | 1 848 | 104.1 | 14.2 | 64.5 | 0.023 | 0.0001 | 0.22 | 9.52 | 9.88 | 2.3 | 1.2 | 495 | 840 | 9.51 | 9.91 | 2.30 | 1.19 | 494 | 840 |
| 40 | 1 640 | 1 770 | 126.0 | 12.0 | 63.0 | 0.029 | 0.047 | 0.27 | 9.48 | 9.60 | 1.95 | 0.99 | 510 | 840 | 9.49 | 9.66 | 2.00 | 0.99 | 516 | 847* |
| 41 | 1 726 | 1 933 | 91.8 | 14.7 | 62.8 | 0.023 | 0.0001 | 0.22 | 9.52 | 9.88 | 2.3 | 1.2 | 480 | 840 | 9.53 | 9.82 | 2.29 | 1.26 | 481 | 833* |

* 为检测样本

本文在实验的基础上,提出将材料的力学性能及部分材料合金成分作为网络的输入量,材料的其它合金成分及热处理温度作为网络的输出,来建立反映实验数据内在规律的数学模型,根据对材料的力学性能要求,直接确定各种合金成分含量和热处理温度,克服了各种优化方法计算量大,难于寻找最优解的缺点,为材料的设计提供了有效的手段。

C99 钢系我国独创的新型高强高韧钢,与国外 AF1410、Aermet100 相比,在动、静态下均具有优异的综合性能,我们以此钢的力学性能指标为标准,利用上面训练好的网络估计材料应包含的合金成分含量及相应的热处理温度,以获得相应的性能指标。网络的计算结果列于表 2。

表 2 合金含量及热处理温度
Tab.2 Alloy element content and heating treatment temperature

| C/ % | Ni/ % | Co/ % | Cr/ % | Mb/ % | 时效/ | 淬火/ |
|--------|-------|-------|-------|-------|-----|-----|
| 0.214 | 9.92 | 10.05 | 2.42 | 1.06 | 462 | 878 |
| 0.227 | 9.79 | 10.02 | 2.21 | 1.07 | 474 | 879 |
| #0.241 | 9.68 | 9.93 | 1.98 | 1.08 | 487 | 880 |
| 0.254 | 9.59 | 9.75 | 1.76 | 1.08 | 498 | 880 |
| 0.267 | 9.52 | 9.48 | 1.58 | 1.07 | 505 | 881 |

计算中除 C 外,其它输入条件同表 1 中 32 号样

本,可见 # 方案与 32 号样本非常接近,说明我们的方法是有效的。

3 结论

将材料的力学性能及部分材料合金成分作为网络的输入,材料的其它合金成分及热处理温度作为网络的输出,来建立反映实验数据内在规律的数学模型,根据对材料的力学性能要求,直接确定各种合金成分含量和热处理温度的新方法,克服了各种优化算法计算量大,难于寻找最优解的缺点,为材料的设计提供了有效的手段,具有重大应用前景。

参考文献

- 1 Garrison W M, Jr Moody N R. The influence of inclusion spacing and microstructure on the fracture toughness of the secondary hardening steel AF1410. *Metal. Trans. A*, 1987; 18A: 1 257 ~ 1 263
- 2 苏杰,李荣,吴宝榕. 高 Co - Ni 二次硬化马氏体钢的发展. *钢铁研究学报*, 1995; 7(4) : 67 ~ 72
- 3 何明一著. *神经计算原理. 语言. 设计. 应用*. 西安: 西安电子科技大学出版社, 1992: 3 ~ 10
- 4 张国英,刘贵立,曾梅光等. 人工神经网络在材料设计中的应用. *材料科学与工艺*, 1999; 7(3) : 93 ~ 96
- 5 Geng P, Zheng M G, Qing C F. ANN optimization method for high strength high fracture toughness steel. *J. Mater. Sci. Technol.*, 1998; 14: 185 ~ 187

(上接第 43 页)

物,电子离域增大,可使电损耗增大;另外,侧链吸波官能团(视黄基)直接挂在大分子的主链上,那样整个大分子就是一个大键,络合物具有更多的电子及长的共轭双键链,这些都对电荷的传导有着重要作用,从而加大了电损耗。

3.4 密度

用比重瓶法测定络合物的密度为 1.279 g/cm³, 属低密度物质。

4 结论

(1) 所合成的大分子视黄基席夫碱盐(样品)微波吸收剂为逆磁性物质,其结构经元素分析、红外光谱(IR)、电子自旋共振波谱(ESR)等一系列测试手段所鉴定。

(2) 样品的反射率大于 11 dB(雷达可探测距离缩短一半)的吸收频带为 9.0 GHz ~ 12.1 GHz。

(3) 样品的密度较低,小于 2 g/cm³。

参考文献

- 1 赵稼祥. 隐身材料的发展和现状. *中国航天*, 1993; (6) : 38
- 2 Stonier Roger A. Stealth aircraft & thchnology from world war II to the gulf. *Sampe Journal*, 1991; (7/ 8) : 9
- 3 Stonier Roger A. Stealth aircraft & thchnology from world war II to the gulf. *Sampe Journal*, 1991; (9/ 10) : 9
- 4 [美] EM 费蒂斯,洪啸吟等译. *高分子合成*. 北京: 科学出版社, 1987: 42 ~ 43
- 5 王少敏,高建平,于九皋,李卫国,王为. 视黄基席夫碱盐的合成及其吸波性能. *应用化学*, 1999; (16) : 42