

На правах рукописи

Родионов Егор Сергеевич

**ПОСТРОЕНИЕ И ОПТИМИЗАЦИЯ МОДЕЛИ ДИСЛОКАЦИОННОЙ
ПЛАСТИЧНОСТИ МЕТАЛЛОВ НА ОСНОВЕ ЭКСПЕРИМЕНТА, SPH
МОДЕЛИРОВАНИЯ И МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ**

Специальность 1.3.3. Теоретическая физика

АВТОРЕФЕРАТ

Диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико–математических наук

Челябинск, 2023

Работа выполнена на кафедре общей и теоретической физики ФГБОУ ВО «Челябинский государственный университет»

Научный руководитель: **Майер Александр Евгеньевич**, доктор физико-математических наук, доцент, заведующий кафедрой общей и теоретической физики ФГБОУ ВО «Челябинский государственный университет» (г. Челябинск)

Официальные оппоненты: **Плехов Олег Анатольевич**, доктор физико-математических наук, член-корреспондент Российской академии наук, директор Пермского федерального исследовательского центра УрО РАН (г. Пермь).

Скрипняк Владимир Альбертович, доктор физико-математических наук, заведующий кафедрой механики деформируемого твердого тела ФГАОУ ВО «Национальный исследовательский Томский государственный университет» (г. Томск).

Ведущая организация: ФГБУН Федеральный исследовательский центр проблем химической физики и медицинской химии РАН (г. Черноголовка)

Защита состоится 01 марта 2024 г. в 14:00 часов на заседании диссертационного совета 24.2.431.01 при ФГБОУ ВО «Челябинский государственный университет» по адресу: 454001 г. Челябинск, ул. Братьев Кашириных, 129.

С диссертацией можно ознакомиться в научной библиотеке Челябинского государственного университета и на сайте <https://www.csu.ru>.

Автореферат разослан «___» _____ 2023 г.

Ученый секретарь
диссертационного совета
24.2.431.01,
д-р. физ.-мат. наук, доцент

Загребин М.А.

Общая характеристика работы

Актуальность темы исследования. Исследование динамической пластичности и прочности материалов представляет собой актуальную задачу, поскольку динамическое нагружение часто имеет место в различных гражданских и оборонных приложениях. Для прогнозирования поведения материалов в таких условиях насущной задачей является развитие теоретических моделей динамической деформации и оптимизация их параметров (обучение) под конкретный материал с учетом его исходного микроструктурного состояния, используя данные экспериментальных исследований. Существующие экспериментальные методы динамических испытаний охватывают широкий диапазон скоростей деформации – до 10^9 с^{-1} . Одним из широко используемых методов являются тесты Тейлора [1–4] по высокоскоростному соударению цилиндров из исследуемых материалов с жесткой стенкой (наковальней) при характерной скорости в несколько сотен метров в секунду. Испытания на удар по Тейлору сочетают большие неравномерные деформации и большие скорости деформации в диапазоне 10^4 – 10^5 с^{-1} . Они используются в настоящее время, как для определения динамических характеристик материалов, включая чистые металлы [5,6], обычные и высокоэнтропийные сплавы [7], так и для оптимизации параметров моделей материалов [8–11]. Недостаток этой методики с точки зрения интерпретации результатов связан с крайне неравномерной деформацией материала по образцу.

Параметризация механических моделей путем сравнения с данными экспериментов или атомистического моделирования является насущной проблемой, и разработка подходов к машинному обучению очень актуальна в этой области. Мощным инструментом является статистический метод Байеса [12], заключающийся в случайном переборе наборов параметров и оценке квазивероятности каждого набора по соответствию между предсказаниями модели и обучающими данными. Уолтерс и др. [13] успешно использовали эксперименты по соударению металлических пластин и метод Байеса для калибровки модели Джонсона-Кука; быстрый эмулятор (модель гауссовой регрессии) был обучен предсказывать результаты численного моделирования, чтобы заменить полную численную модель в байесовском алгоритме и ускорить процесс оптимизации. Модель Джонсона-Кука редко используется для моделирования ударно-волновых задач, но байесовская оптимизация позволила авторам получить приемлемое соответствие с экспериментальными временными профилями скорости свободной поверхности. Нгуен и др. [14] применили

аналогичный подход для калибровки модели дислокационной пластичности, а затем использовали калиброванную модель для численного исследования анизотропии деформации в тестах Тейлора с монокристаллами тантала. Сью и др. [15] развили предыдущий подход к калибровке [13] путем включения данных четырех типов испытаний: квазистатическое сжатие, стержень Гопкинсона, цилиндры Тейлора и эксперименты по соударению пластин. В этом наборе цилиндры Тейлора обеспечивают большие истинные деформации (до 3), но ограниченные скорости деформации (10^4 с^{-1}), в то время как эксперименты по соударению пластин обеспечивают скорости деформации на два порядка выше (10^6 с^{-1}), но ограниченные деформации (примерно до 0,1). В этом смысле значительный интерес представляет увеличение скорости деформации при сохранении больших деформаций за счет профилирования головной части цилиндра в тестах Тейлора. Ривера и др. [10] использовали классические тесты Тейлора и алгоритм Байеса для калибровки эмпирической модели пластичности Престона-Тонкса-Уоллеса [16] для тантала.

Настоящая работа посвящена разработке трехмерной численной модели высокоскоростной пластической деформации с учетом кинетики дислокаций, а также методики применения машинного обучения для определения параметров теоретической модели пластичности по наборам экспериментальных данных. Проведены тесты Тейлора для классических и профилированных в головной части цилиндров из меди, латуни и дюралюминия. Форма образцов варьировалась для увеличения обучающего набора данных и подбиралась таким образом, чтобы увеличить деформацию и скорость деформации в головной части образца при меньших скоростях соударения. Для параметризации модели использовался метод Байеса: для случайных наборов параметров модели конечные экспериментальные формы образцов сравниваются с прогнозом численной модели. Для ускорения процесса параметризации численная модель заменяется эмулятором в виде искусственной нейронной сети (ИНС), обученной на результатах численных расчетов.

Цель диссертационной работы разработка трехмерной теоретической модели динамической деформации металлов на основе подхода кинетики дислокаций, а также разработка метода оптимизации параметров (обучения) модели под конкретный материал с использованием набора собственных экспериментальных данных.

Задачи диссертационной работы:

1. Разработка трехмерной теоретической модели деформации металлов на основе численного метода сглаженных частиц (SPH – smoothed particle hydrodynamics) и дислокационно-кинетического подхода при описании пластичности. Разработка параллельной версии кода и создание с ее помощью базы данных результатов расчетов при различных параметрах модели, геометрии образца и скорости соударения.
2. Обучение искусственной нейронной сети (ИНС) по базе данных результатов расчетов в качестве быстрого эмулятора кода SPH.
3. Проведение экспериментальных исследований по высокоскоростному соударению цилиндрических и профилированных ударников из меди и латуни, определение их размеров после деформации и исследование их микроструктуры. Создание базы данных для оптимизации модели.
4. Оптимизация параметров модели пластичности по экспериментальным данным с помощью статистического метода Байеса с использованием ИНС в качестве эмулятора SPH. Сравнение результатов расчетов SPH с оптимизированными параметрами с экспериментальными данными.
5. Разработка метода оценки динамического предела текучести по тестам Тейлора с уменьшенными цилиндрами в головной части.

Научная новизна состоит в следующем:

1. Впервые предложена реализация численного метода гидродинамики сглаженных частиц (SPH), дополненная моделью дислокационной пластичности с учетом измельчения зеренной структуры и образования порообразных структур вследствие аннигиляции дислокаций (модель каскада энергии).
2. Впервые предложено эмулировать работу кода SPH с помощью искусственной нейронной сети с целью существенного ускорения параметризации модели дислокационной пластичности.
3. Впервые в тестах Тейлора предложено концентрировать энергию удара в головной части образца за счет ее профилирования (модификация формы ударников), что позволяет в условиях ограниченных скоростей соударения около 120 м/с получать пластически деформированные образцы со скоростями деформации до 10^5 с⁻¹ и величиной деформации до единиц. При таких условиях деформации в головной части медных образцов развиваются трещины и порообразные структуры, а в случае латунных образцов достигается разрушение головной части на множественные мелкие фрагменты.

Использование различных форм ударников позволяет более точно параметризовать модель пластичности и кинетики дислокаций.

4. С помощью статистического метода Байеса впервые развит теоретический подход на основе машинного обучения к оптимизации параметров модели пластичности по множеству экспериментов с различными скоростями соударения и формами ударников.

5. Впервые предложен и обоснован новый аналитический метод оценки динамического предела текучести и скорости деформации для ударников с головной частью в виде уменьшенного цилиндра по изменению геометрии образца.

Практическая значимость работы. Разработанный теоретический подход на основе машинного обучения к описанию деформации в металлах можно применять к различным материалам и сплавам для параметризации моделей материалов. Такой подход позволяет добиться хорошего соответствия теории эксперименту и, как следствие, прогнозировать поведение материала при динамической деформации при решении научных и инженерных задач.

Достоверность результатов. Точность и достоверность полученных результатов в первую очередь обоснована соответствием результатов численного моделирования собственным экспериментальным данным (тесты Тэйлора), а также экспериментальным данным из литературных источников (высокоскоростное соударение пластин). Численный метод SPH является хорошо апробированным в литературе, в том числе для описания деформируемого твердого тела; достоверность численного метода и его программной реализации также подтверждается решением тестовых задач. Подход на основе кинетики дислокаций физически обоснованным образом описывает процесс пластической деформации металла и ранее успешно апробирован для описания динамической деформации металлов. Методы машинного обучения являются современной, динамически развивающейся областью и показывают свою эффективность при решении задач теоретической физики.

Результаты и положения, выносимые на защиту:

1. Трехмерная теоретическая модель упругопластической деформации металлов при высокоскоростном соударении на основе метода сглаженных частиц (SPH) и подхода дислокационной пластичности, включая подмодель для оценки измельчения зерен и образования порообразных структур на основе представлений о каскаде энергии между уровнями дефектной структуры материала. Разработанная модель качественно и

количественно правильно описывает экспериментальные данные, включая изменение формы и микроструктуры динамически деформированных образцов.

2. Вывод о возможности использования искусственной нейронной сети (ИНС) в качестве быстрого эмулятора трехмерного численного кода SPH для оценки влияния параметров модели на изменение геометрических размеров образца при высокоскоростном соударении. Один расчет SPH в однопоточном режиме требует порядка суток, а ИНС эмулятор срабатывает за 10^{-4} с.

3. Результаты экспериментов (тестов Тейлора) с классическими и профилированными образцами для твердой холоднокатаной меди, латуни и дюралюминия. Использование профилированных в головной части ударников позволяет добиться скоростей деформации до 10^5 с⁻¹ при скорости соударения порядка 120 м/с, а также разрушения хрупкого материала (латуни и дюралюминия) при аналогичных скоростях соударения.

4. Теоретический подход на основе машинного обучения для оптимизации параметров (обучения) модели дислокационной пластичности под конкретный материал по наборам экспериментальных данных тестов Тейлора для классических и профилированных образцов. Оптимизация параметров проводится статистическим методом Байеса с использованием ИНС-эмулятора трехмерной численной модели SPH. Использование обучающих экспериментальных данных для разных форм образцов и скоростей соударения дает более четкую локализацию области оптимальных параметров модели. Развитый подход к оптимизации параметров модели позволяет правильно оценивать состояние образцов до деформации, в частности, для холоднокатанной меди начальная плотность дислокаций определена как $0.8 \cdot 10^{14}$ м⁻², что соответствует оценкам из микроструктурных наблюдений и литературным данным для деформированной меди.

5. Аналитическая оценка динамического предела текучести и скорости деформации по изменению длины уменьшенной головной части образцов, применяемая при скоростях соударения, при которых не наступает деформация основной части образца (до 90 м/с для меди).

Личный вклад автора. В ходе выполнения научно-квалификационной работы автор принимал активное участие в формулировке целей и задач исследования, проводил разработку теоретической модели и ее численную реализацию, численное моделирование, экспериментальные исследования по соударению образцов и анализу микроструктуры, а также обработку и анализ полученных данных. Экспериментальные

исследования и микроструктурный анализ проводились совместно с Лупановым В.Г. Блок работ по построению теоретической модели, реализации и отладке численного кода SPH, дополненного моделью кинетики дислокаций выполнен совместно с Майером А.Е., Майер П.Н. и Грачёвой Н.А. Блок работ по обучению искусственной нейронной сети для эмулирования работы SPH и параметризации модели пластичности с помощью статистического метода Байеса проводился совместно с Погорелко В.В. и Майером А.Е. Развитие приближенного метода оценки предела текучести, скорости деформации и времени остановки образца проводилось совместно с Майером А.Е. Автор участвовал в подготовке результатов исследования к публикации и представлял их на научных конференциях. По всем блокам работ, представленным в диссертации, вклад автора был определяющим или существенным в достаточной степени, чтобы выносить их на защиту.

Апробация результатов работы. Результаты исследований представлены на конференциях:

- XXXVI International Conference on Interaction of Intense Energy Fluxes with Matter (ELBRUS 2021). Россия, п. Терскол, 2021. Стендовый доклад.
- XLVII Международная молодёжная научная конференция «Гагаринские чтения». Россия, г. Москва, 2021. Устный доклад.
- Международный симпозиум «Перспективные материалы и технологии» (Минск, Беларусь). Беларусь, г. Минск, 2021. Устный доклад.
- Международная конференция XV Забабахинские научные чтения. Россия, г. Снежинск, 2021. Устный доклад.
- 64-ая Всероссийская научная конференция МФТИ. Россия, г. Москва, 2021. Устный доклад.
- «XXXVII Фортовская международная конференция по уравнениям состояния вещества (ELBRUS 2022)». Россия, п. Терскол, 2022. Стендовый доклад.
- «Физическая мезомеханика материалов. Физические принципы формирования многоуровневой структуры и механизмы нелинейного поведения». Россия, г. Томск, 2022. Устный доклад.
- Международная конференция XVI Забабахинские научные чтения. Россия, г. Снежинск, 2023. Устный доклад.

–«Физическая мезомеханика материалов. Материалы с многоуровневой иерархически организованной структурой и интеллектуальные производственные технологии». Россия, г. Томск, 2023. Устный доклад.

Публикации. Результаты исследований опубликованы в 3 статьях в журналах, входящих в систему цитирования Scopus и приравненных к рекомендованным ВАК Минобрнауки РФ, а также в 5 тезисах докладов.

Структура и объем диссертации. Диссертационная работа содержит введение, 4 главы, заключение, публикации автора и список литературы. Объем диссертации составляет 173 страницы, при этом объем цитируемых источников – 155 ссылок.

Основное содержание работы

Во введении описана актуальность работы, поставлена цель и выдвинуты задачи, аргументирована научная новизна и практическая значимость работы, а также сформулированы положения и результаты, выносимые на защиту, личный вклад автора, приведены сведения об апробации работы и публикациях.

В первой главе проведен обзор методик проведения экспериментальных исследований динамической деформации материалов, в частности, теста Тэйлора, моделей пластичности, численных методов, современных представлений о методах параметризации моделей материалов, методов машинного обучения. В разделе 1.1 рассмотрен тест Тэйлора для проведения динамических испытаний металлов. Такая методика позволяет обеспечить большие истинные деформации (до 3) и скорости деформации до 10^5 с^{-1} . В разделе 1.2 рассмотрены модели дислокационной пластичности и вязкопластические модели, связывающие предел текучести материала со скоростью деформации, пластической деформацией и температурой. В разделе 1.3 рассмотрен численный метод гидродинамики сглаженных частиц (SPH), принцип работы которого заключается в делении вещества на дискретные элементы (частицы) и размазывании параметров течения вокруг центров частиц в соответствии с используемым ядром. В разделе 1.4. рассмотрены современные методы параметризации численных моделей, в частности, статистический метод Байеса. В разделе 1.5 приводится краткий обзор искусственных нейронных сетей (ИНС). В выводах по первой главе формируется постановка задачи диссертационной работы с учетом современных тенденций в области исследования.

Во второй главе дислокационной пластичности [17–22] формулируется в трехмерной постановке. Модель дополнена учетом измельчения зеренной структуры

материала и ростом ослабленных участков материала. Предложен численный метод решения уравнений на основе метода сглаженных частиц (SPH).

Законы сохранения определяют эволюцию плотности ρ , скорость \mathbf{v} и удельной внутренней энергии E :

$$\frac{d\rho}{dt} = -\rho(\nabla \cdot \mathbf{v}), \quad (1)$$

$$\rho \frac{d\mathbf{v}}{dt} = (\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}), \quad (2)$$

$$\rho \frac{dE}{dt} = -P(\nabla \cdot \mathbf{v}) + \beta(\mathbf{S} : \dot{\mathbf{w}}), \quad (3)$$

где $\boldsymbol{\sigma} = -P\mathbf{I} + \mathbf{S}$ тензор напряжений, P – давление и \mathbf{S} – тензор девиаторов напряжений; \mathbf{I} – единичный тензор, $\beta = 0.9$ – коэффициент Тейлора–Квинни.

Девиатор напряжения \mathbf{S} рассчитывается из закона Гука:

$$\mathbf{S} = 2G \left[\mathbf{u} - \frac{1}{3} \text{tr}(\mathbf{u})\mathbf{I} - \mathbf{w} \right], \quad (4)$$

где G – модуль сдвига. Уравнение для тензора макроскопических деформаций \mathbf{u} :

$$\frac{d\mathbf{u}}{dt} = \frac{1}{2} \left[(\nabla \otimes \mathbf{v}) + (\nabla \otimes \mathbf{v})^T \right] + \left[(\mathbf{u} \cdot \dot{\mathbf{R}}) + (\dot{\mathbf{R}}^T \cdot \mathbf{u}) \right], \quad (5)$$

где тензор скорости вращения:

$$\dot{\mathbf{R}} = \frac{1}{2} \left[(\nabla \otimes \mathbf{v}) - (\nabla \otimes \mathbf{v})^T \right]. \quad (6)$$

Изменение \mathbf{w} в лабораторной системе координат определяется скольжением дислокаций $\dot{\mathbf{w}}$ и вращением элементов вещества:

$$\frac{d\mathbf{w}}{dt} = \dot{\mathbf{w}} + \left[(\mathbf{w} \cdot \dot{\mathbf{R}}) + (\dot{\mathbf{R}}^T \cdot \mathbf{w}) \right], \quad \dot{\mathbf{w}} = \sum_{\delta} b\mathbf{M}^{\delta} \rho_{\text{D}}^{\delta} V_{\text{D}}^{\delta}, \quad (7)$$

где δ нумерует системы скольжения дислокаций, b – модуль вектора Бюргерса и V_{D}^{δ} – скорость скольжения дислокаций. Учитываются как подвижные, так и неподвижные дислокации, характеризующиеся скалярными плотностями ρ_{D}^{δ} и ρ_{I}^{δ} , соответственно. Уравнения кинетики выражают баланс скоростей размножения Q_{D}^{δ} , иммобилизации дислокаций Q_{I}^{δ} и аннигиляции подвижных дислокаций Q_{A}^{δ} и подвижных дислокаций на неподвижных Q_{AI}^{δ} [18]:

$$\frac{d\rho_D^\delta}{dt} = Q_D^\delta - Q_I^\delta - Q_A^\delta - Q_{AI}^\delta - \rho_D^\delta (\nabla \cdot \mathbf{v}), \quad (8)$$

$$\frac{d\rho_I^\delta}{dt} = Q_I^\delta - Q_{AI}^\delta - \rho_I^\delta (\nabla \cdot \mathbf{v}). \quad (9)$$

Последние слагаемые в уравнениях (8) и (9) учитывают сжатие вещества. Для расчета Q_D^δ используется энергетический подход [17]:

$$Q_D^\delta = k_D b \rho_D^\delta |F_D^\delta V_D^\delta|, \quad (10)$$

где коэффициент $k_D = (1 - \beta) / \varepsilon_D$, а $\varepsilon_D = 8 \text{ eV} / b$ – энергия дислокации на единицу длины. Скорость иммобилизации [18]:

$$Q_I^\delta = V_I (\rho_D^\delta - \rho_D^{\text{free}}) \sqrt{\rho_I^\delta}, \quad (11)$$

где ρ_D^{free} – пороговое значение плотности дислокаций, при котором начинается иммобилизация. Скорости аннигиляции:

$$Q_A^\delta = 2k_A b |V_D^\delta| (\rho_D^\delta)^2, \quad Q_{AI}^\delta = k_A b |V_D^\delta| (\rho_D^\delta \rho_I^\delta), \quad (12)$$

где k_A – коэффициент аннигиляции. Деформационное упрочнение:

$$Y_s = Y_{s0} + A_1 G b \sqrt{\rho_1}, \quad \rho_1 = \sum_{\delta} \rho_1^\delta, \quad (13)$$

где Y_{s0} – статический предел текучести в материале без дислокации.

В разделе 2.2 предложены дополнительные уравнения модели дислокационной пластичности, учитывающие измельчение зерен в материале, а также образование порообразных структур на основе представлений о каскаде энергии между уровнями дефектной системы материала [20] как развитие энергетического подхода [17,18]. Часть пластической работы передается дислокационной подсистеме, уравнение (10), но дислокации не могут накапливать энергию бесконечно: плотность дислокаций выходит на насыщение за счет аннигиляции, уравнение (12). Суммарная мощность, выделяющаяся в единице объема вследствие аннигиляции равна

$$\Pi = \varepsilon_D \sum_{\delta} (Q_A^\delta + 2Q_{AI}^\delta), \quad (14)$$

В модели аннигиляционные стоки учитывают все эффекты уменьшения плотности дислокаций, которые в реальном материале включают поглощение границами зерен

(ГЗ), приводящее к увеличению угла разориентировки и образованию большеугловых границ зерен. Считаем, что доля η_{GB} от выделяемой мощности расходуется на формирование новых большеугловых ГЗ, т. е. на измельчение зеренной структуры:

$$d = \left[d_0^{-1} + \frac{\eta_{GB}}{3\gamma_{GB}} \int_0^t \Pi dt' \right]^{-1}, \quad (15)$$

где $d_0 \approx 18$ мкм – начальный диаметр зерна до динамического нагружения.

Помимо измельчения зерен, в экспериментах наблюдается образование порообразных структур как ослабленных областей материала. Предположим, что оставшаяся доля $(1 - \eta_{GB})\Pi$ высвобождаемой мощности расходуется на полный разрыв атомных связей части атомов по границам порообразных структур. Долю атомов с разорванными связями можно оценить снизу как:

$$f = \frac{(1 - \eta_{GB})}{\varepsilon_s n_0} \int_0^t \Pi dt', \quad (16)$$

где $n_0 \sim 10^{29} \text{ м}^{-3}$ – концентрация атомов, $\varepsilon_s \approx Gb^3 \approx 4.5 \text{ эВ}$ – энергия сублимации. Порообразные структуры представляют собой ослабленные участки с неупорядоченной поверхностью, которые выкрашиваются при травлении шлифа. Предполагая, что атомные связи полностью разорваны только на площади поверхности толщиной b вокруг каждой пороподобной структуры, объемная доля этих ослабленных областей оценивается следующим образом:

$$\alpha = \frac{(\pi D^3/6)}{(\pi D^2 b)} f = \frac{D(1 - \eta_{GB})}{6b\varepsilon_s n_0} \int_0^t \Pi dt', \quad (17)$$

где D – диаметр порообразных структур. Оптическая микроскопия дает диаметры 10–40 мкм и 20 мкм используется в качестве оценки.

В разделе 2.3 описывается уравнение состояния, связывающее давление и температуру с плотностью и энергией материала, в виде искусственной нейронной сети (ИНС). Уравнение состояния в форме ИНС обучено по данным молекулярной динамики (МД) для гидростатического сжатия и растяжения репрезентативных объемных элементов металла.

В разделе 2.4 описывается реализация модели дислокационной пластичности с помощью численного метода сглаженных частиц (SPH). Пространственные

производные находятся при помощи уравнений SPH с ядром в виде кубического сплайна, а уравнения модели дислокационной пластичности рассчитываются для каждой частицы отдельно. Следует отметить, что модель дислокационной пластичности [17,18] впервые реализована в трехмерной постановке.

В разделе 2.5 представлены результаты тестирования численной схемы на задаче об упругом соударении шаров и упругом простом растяжении. В тесте на упругое соударение коэффициент восстановления скорости равен 0,993, что практически соответствует абсолютно упругому удару. Полная энергия системы сохраняется с высокой точностью при упругих и пластических деформациях.

Выводы по третьей главе: впервые в трехмерной постановке сформулирована теоретическая модель динамической деформации металлов с учетом кинетики дислокаций и моделью каскада энергии между уровнями дефектной структуры материала, предложена ее численная реализация на основе SPH (Положение № 1).

В третьей главе приводится описание экспериментальной части работы, включая схему экспериментальной установки, начальные образцы, результаты динамических испытаний и микроструктурный анализ образцов. Также выведены формулы для приближенной аналитической оценки динамического предела текучести и скорости деформации для случая профилированных образцов с головной частью в виде цилиндра уменьшенного диаметра.

Для проведения динамических испытаний используется ударная труба, установленная в лаборатории общей и прикладной физики ЧелГУ. Она была модифицирована для разгона металлических ударников диаметром до 12 мм, для этого внутри ударной трубы помещается полипропиленовая труба, выдерживающая давления до 10 бар; схема установки представлена на рис. 1 (а).

Исследовались образцы бескислородной холоднокатанной меди М1Т, отожженной меди М1Т, латуни ЛС 59-1 ПТ и дюралюминия Д16Т. Металлы в исходном состоянии представляли собой холоднокатанные прутки диаметром 8 мм. Были нарезаны цилиндрические образцы длиной по 40 мм каждый. Для повышения вариативности обучающих данных часть образцов была профилирована в головной части для получения следующих форм: (1) уменьшенный цилиндр диаметром 3 мм и длиной 10 мм; (2) аналогичный цилиндр диаметром 4 мм и (3) усеченный конус с длиной обработанной части 20 мм и минимальным диаметром 2 мм, см. рис 1(б).

Образцы запускались со скоростями соударения до 125 м/с в случае медных и латунных образцов и до 212,7 м/с в случае дюралюминиевых образцов.

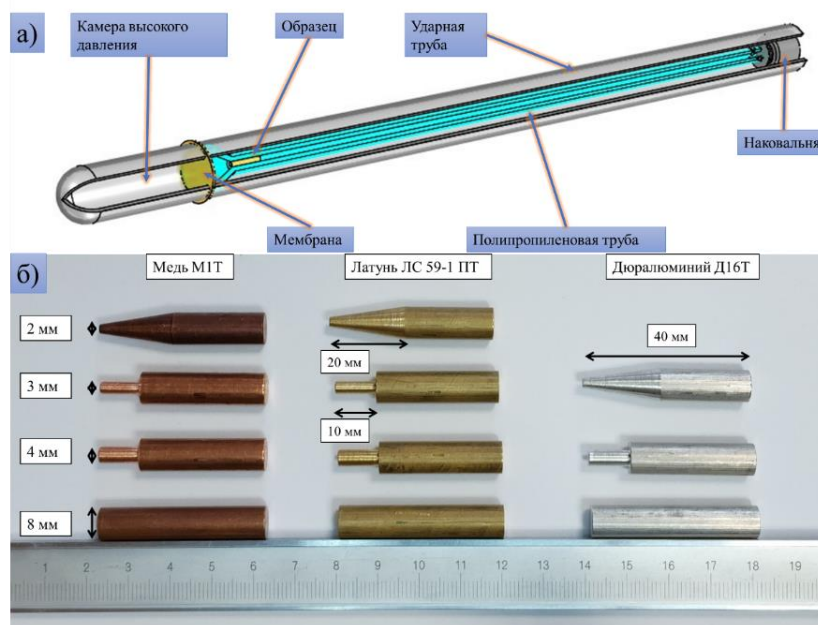


Рисунок 1. Схематическое изображение ударной трубы (а), фотография недеформированных классических и модифицированных ударников для проведения динамических испытаний (б).

В разделе 3.2 приводятся результаты динамических испытаний медных, латунных и дюралюминиевых ударников. Профилирование медных ударников позволяет увеличить деформацию головной части до величины порядка единицы при скорости соударения до 120 м/с. На профилированных латунных и дюралюминиевых образцах при такой скорости соударения наблюдается разрушение. Деформированные медные ударники в сравнении с результатами моделирования показаны на рис. 5.

В разделе 3.3 приведены результаты микроструктурного исследования при помощи оптической микроскопии. В исходных образцах зерна со средним диаметром около 18 ± 4 мкм вытянуты в направлении прокатки. Видна сетчатая структура субзерен размером до 3 мкм. Отчетливо видны полосы локализации пластического течения шириной 10-20 мкм, состоящие из мелких зерен размером менее 3 мкм. В динамически деформированных образцах вблизи ударной поверхности наблюдается уменьшение размера зерна до величины менее 1 мкм, также здесь обнаруживается ряд порообразных структур диаметром 10-40 мкм (ослабленных участков, выкрошившихся при травлении) и полос локализации. Сравнение экспериментально измеренного размера с результатами численного моделирования показано на рис. 6.

В разделе 3.4 предложена теоретическая оценка динамического предела текучести по тестам Тейлора с уменьшенной цилиндрической головной частью образцов в приближении однородности деформации головной части. Выведенные формулы позволяют оценить динамический предел текучести, время остановки и скорость деформации ударников, не используя численные расчеты или дорогостоящее оборудование (высокоскоростные камеры). Результаты оценки в сравнении с другими работами приведены на рисунке 2.

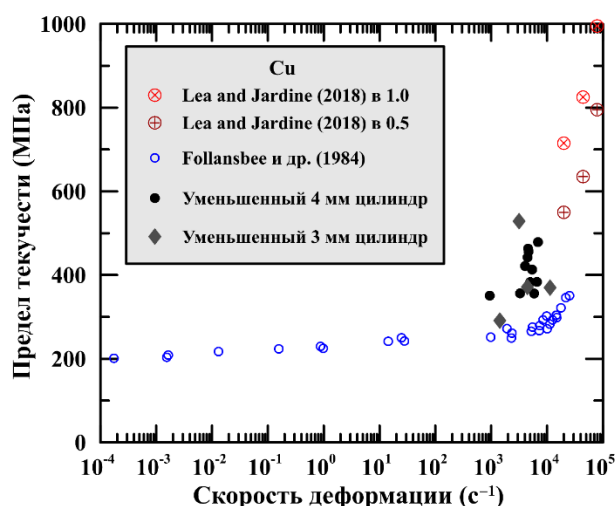


Рисунок 2. Скоростная зависимость предела текучести: наши оценки в сравнении с экспериментальными данными для малой деформации (Follansbee et al., 1984) [24] и для истинной деформации 0.5 и 1 (Lea and Jardine, 2018) [25].

В выводах по второй главе сформулированы Положения № 3 и 5. Делается вывод о том, что профилирование образцов позволяет достигать больших деформаций по сравнению с классическими цилиндрами, увеличивая тем самым пластическую деформацию образца или достигая условий его разрушения.

В четвертой главе описывается развитие методов машинного обучения для идентификации параметров модели дислокационной пластичности. С помощью статистического метода Байеса и собственных экспериментальных данных определены параметры модели для случая медных и латунных образцов. Для ускорения процесса параметризации разработан ИНС-эмулятор трехмерного численного кода.

В разделе 4.1 описан процесс параметризации медных образцов. Используя трехмерное SPH моделирование, готовится база данных для обучения ИНС (более 2000 результатов) и ее валидации (350 результатов). База данных представляет собой набор входных и выходных векторов. На вход ИНС поступает вектор

$\{V_x, \Psi, \rho_I^\delta(t=0), A_I, V_I\}$, где V_x – скорость удара, Ψ – код формы образца, $\rho_I^\delta(t=0)$ – начальная плотность иммобилизованных дислокаций, A_I – коэффициент упрочнения, V_I – скорость иммобилизации. Выход ИНС составляют геометрические параметры, характеризующие степень деформации и форму образца после удара. После обучения ИНС используется как быстрый эмулятор трехмерной модели SPH для определения оптимальных параметров с помощью байесовского алгоритма калибровки. Из эксперимента есть список из 50 строк, содержащих скорость удара V_x , форму образца Ψ и пять значений для сравнения: конечная длина образца, конечный диаметр плоскости соударения, конечная длина головной части, конечная длина задней части цилиндра и переходного диаметра, см. схему на рис. 3 (ж). Три выбранных параметра модели $\{\rho_I^\delta(t=0), A_I, V_I\}$ перебираются случайным образом. Для каждого эксперимента все пять входных данных подаются в ИНС, которая вычисляет выходные значения, и вероятность совпадения выходных значений с экспериментальными значениями оценивается с помощью уравнения:

$$\Pi = \exp \left\{ -\sigma \sum_{n=1}^{N^{EXP}} \sum_{j=1}^5 (Y_{j,n}^{EXP} - Y_{j,n}^{ANN})^2 \right\}, \quad (18)$$

где σ – нормировочная постоянная, $Y_{j,n}^{ANN}$ – j -й выход ИНС для n -го эксперимента, $Y_{j,n}^{EXP}$ – соответствующие экспериментальные характеристики деформированного образца, $N^{EXP} = 50$ – количество различных экспериментов (различные формы образца и скорости удара). Чем выше вероятность Π , тем лучше выбранные параметры описывают экспериментальные результаты.

Поиск оптимальных параметров с помощью быстрого эмулятора на основе ИНС и байесовского подхода был распараллелен с использованием подхода OpenMP. На рис. 3(а-е) представлены проекции распределения вероятностей. Эти распределения приведены для наглядности, а параметры модели с максимальной вероятностью находятся при работе программного алгоритма.

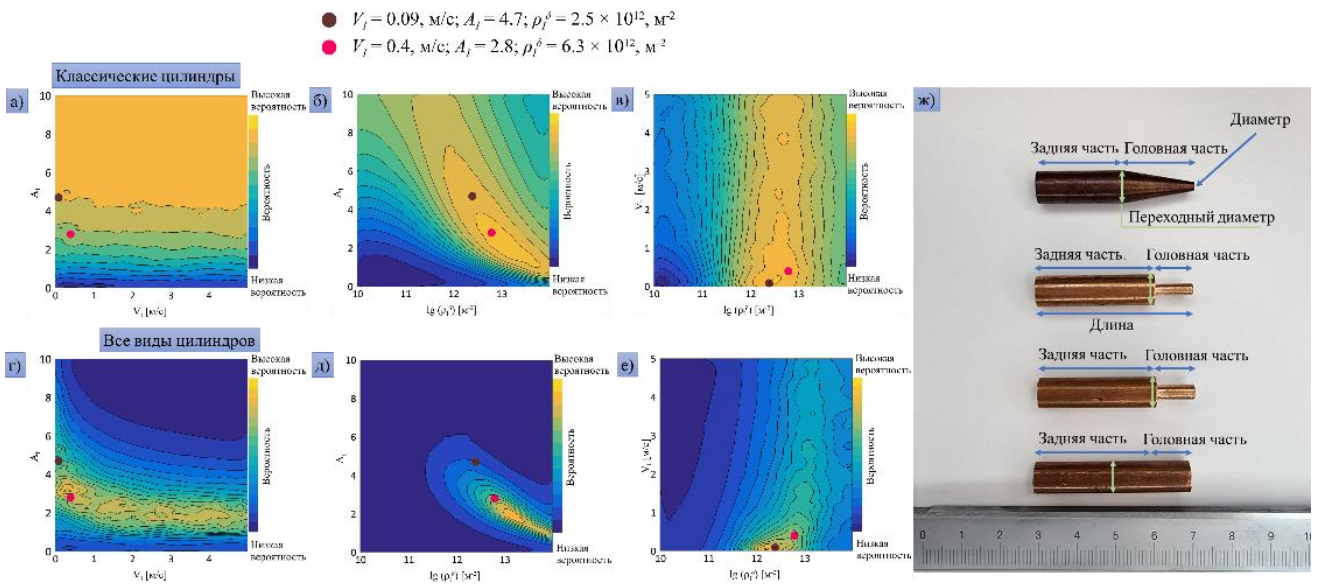


Рисунок 3. Карты распределения вероятностей параметров модели: (а, г) $V_I - A_I$, (б, д) $\rho_I^\delta - A_I$ и (в, е) $\rho_I^\delta - V_I$, (ж) схема измерения выходных параметров: (а-в), построены с использованием только классических цилиндров Тейлора, (г-е) построены с использованием всей серии экспериментов.

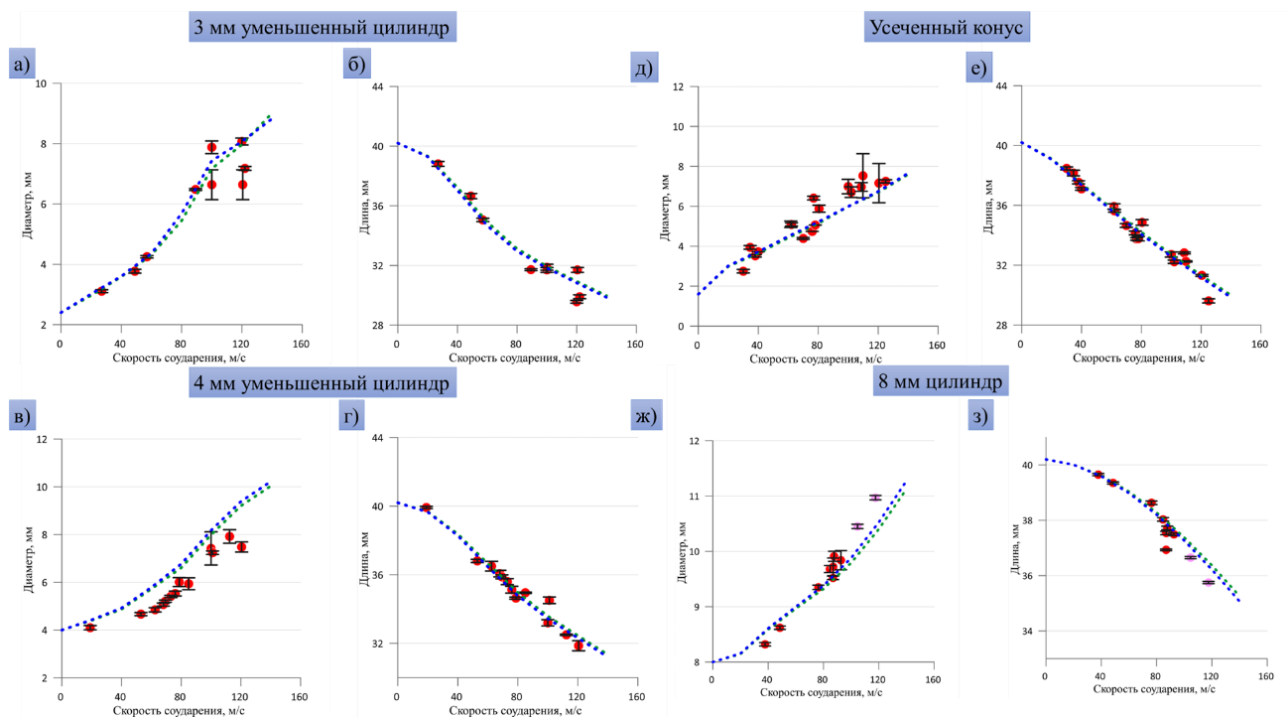


Рисунок 4. Сравнение численных результатов (SPH) с экспериментальными данными: зависимости от скорости удара конечного диаметра ударной поверхности (а,в,д,ж) и конечной длины (б,г,е,з) в случае (а,б) 3-мм и (в,г) 4-мм уменьшенного цилиндра, (д,е) усеченного конуса и (ж,з) 8-мм цилиндра.

В разделе 4.2 приведены результаты сравнения параметризованной трехмерной модели с экспериментальными данными. Сравнение результатов трехмерных SPH расчетов с экспериментом для формы образцов показано на рис. 4 и 5. Сравнение с экспериментом для распределения размера зерен, рассчитанного по численной модели, приведено на рис. 6. В целом, результаты моделирования находятся в хорошем согласии с экспериментальными данными.

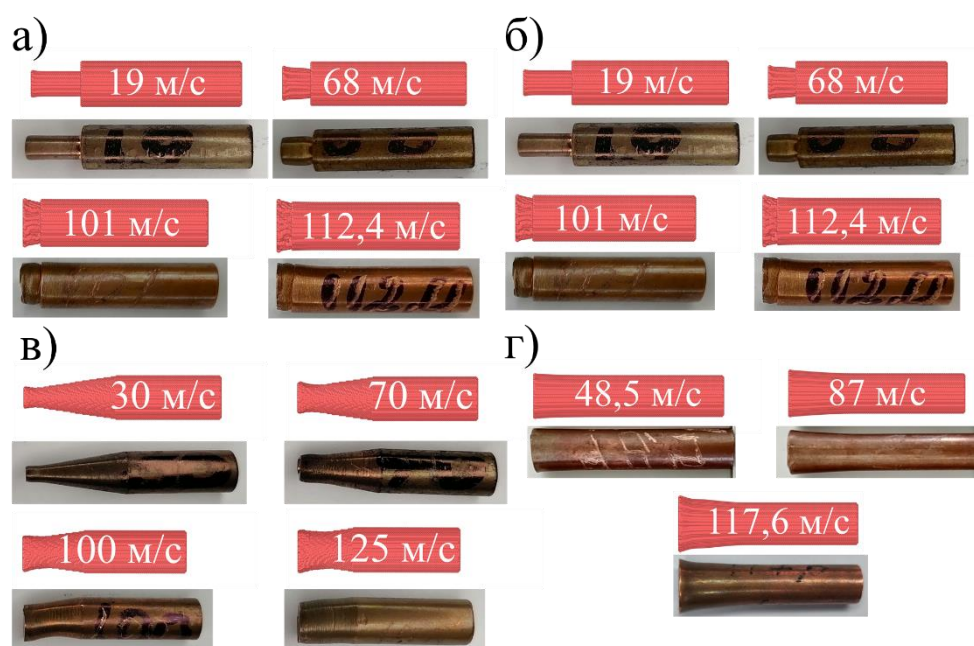


Рисунок 5. Сравнение конечной формы образца после деформации для различных форм ударников.

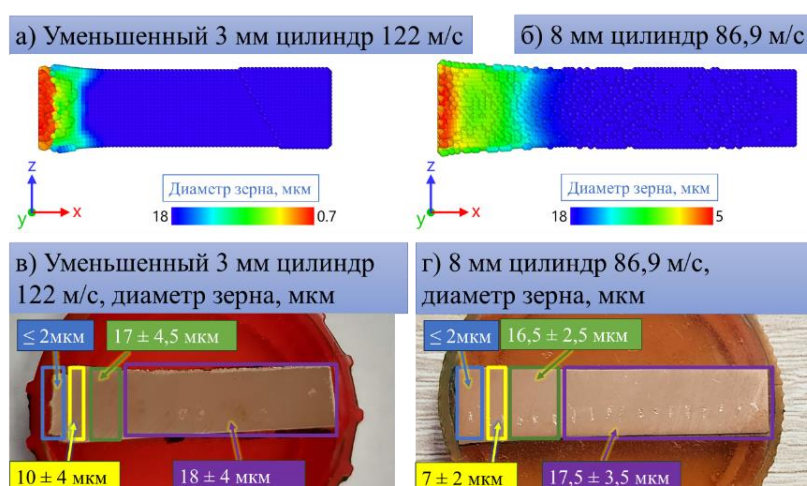


Рисунок 6. Диаметр зерна в профилированном (а,в) и непрофилированном (б,г) медном ударнике: (а,б) численное моделирование и (в,г) эксперимент.

На рис. 7 параметризованная модель сравнивается с экспериментом [23] по высокоскоростному соударению пластин. Такие эксперименты обеспечивают большую скорость деформации, чем в тестах Тэйлора. В экспериментах [23] медные образцы были отожжены в вакууме, поэтому согласие с экспериментом достигается при меньшей начальной плотности дислокаций в модели, чем для холоднокатаной меди, рис. 7(б).

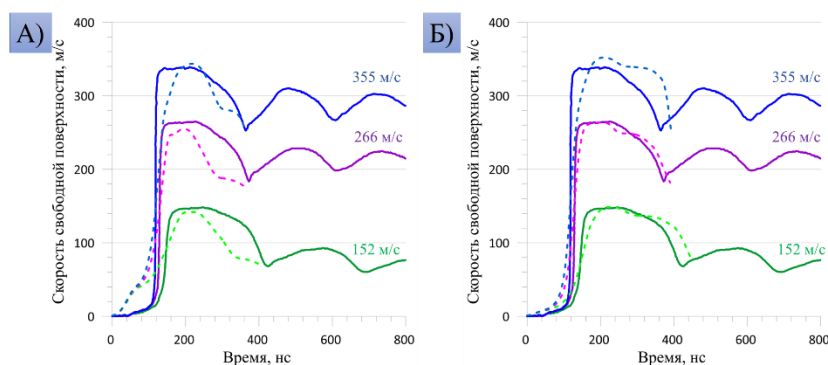


Рисунок 7. Сравнение SPH с экспериментальными данными [23] для высокоскоростного соударения медных пластин: скорости свободной поверхности (эксперимент – сплошная линия, расчеты – пунктир): (а) расчет с $\rho_1^\delta(t=0) = 6.3 \cdot 10^{12} \text{ м}^{-2}$ (холоднокатаная медь) и (б) расчет с уменьшенной $\rho_1^\delta(t=0) = 10^{11} \text{ м}^{-2}$ (отожженная медь).

Раздел 4.3 содержит результаты параметризации модели дислокационной пластичности для случая латунных образцов.

В выводах по четвертой главе сформулированы положения № 2 и 4.

В заключении сформулированы основные результаты диссертационной работы:

1) В диссертационном исследовании впервые разработана и программно реализована трехмерная теоретическая модель динамической деформации металлов на основе представлений о кинетике дислокаций с использованием численной схемы сглаженных частиц (SPH). Предложены уравнения для оценки измельчения зеренной структуры и образования ослабленных участков материала (порообразных структур) на основе представлений о каскаде энергии между уровнями дефектной структуры материала. Модель протестирована на задаче об упругих деформациях и доказала свою адекватность. Разработана параллельная версия кода с использованием OpenMP и с ее помощью подготовлена база данных результатов расчетов при различных параметрах

модели, геометрии образца и скорости соударения для обучения ИНС-эмулятора модели.

2) Показана возможность использования искусственной нейронной сети, обученной по базе данных результатов расчетов по трехмерной теоретической модели, в качестве быстрого эмулятора модели.

3) Проведены эксперименты (тесты Тэйлора) по высокоскоростному соударению цилиндрических и профилированных ударников из меди, латуни и дюралюминия, определено изменение их размеров в результате соударения и исследование их микроструктуры. Результаты проведенных экспериментов составляют базу данных для оптимизации теоретической модели.

4) Предложена методика автоматической параметризации модели дислокационной пластичности с использованием собственных экспериментальных результатов и методов машинного обучения. Для параметризации применяется ИНС-эмулятор модели, а также статистический метод Байеса, сравнивающий экспериментальные результаты с прогнозом ИНС-эмулятора. Модель была параметризована для холоднокатанных медных ударников, при этом доказала свою применимость в сравнении с экспериментами на отожженных медных образцах, для которых параметризация не выполнялась. Параметры модели для латунного сплава были подобраны впервые.

5) Предложена приближенная аналитическая оценка динамического предела текучести по тестам Тейлора с уменьшенными цилиндрами в головной части. Проведено сравнение с результатами трехмерной теоретической модели, которое показало работоспособность предложенной простой оценки.

6) В целом предлагается эффективный метод оптимизации параметров модели дислокационной пластичности. Параметры модели задают конкретный материал и его исходное состояние; поэтому оптимизация необходима для каждого материала отдельно. Область возможных практических приложений разработанной трехмерной теоретической модели включает решение различных инженерных задач, таких как оптимизация процессов высокоскоростной обработки металлов, резанья, упрочнении материала с помощью метода лазерной ударной проковки [26] и т.д. Все эти практические приложения требуют адекватной теоретической модели материала для описания его реакции на динамическое нагружение.

Список публикаций автора по теме диссертации:

Публикации в научных изданиях, рекомендованных ВАК Минобрнауки РФ:

A1. Rodionov E.S., Lupanov V.G., Gracheva N.A., Mayer P.N., Mayer A.E. Taylor Impact Tests with Copper Cylinders: Experiments, Microstructural Analysis and 3D SPH Modeling with Dislocation Plasticity and MD-Informed Artificial Neural Network as Equation of State // *Metals*. – 2022. – V. 12. – P. 264. <https://doi.org/10.3390/met12020264>.

A2. Rodionov E.S., Pogorelko V.V., Lupanov V.G., Mayer P.N., Mayer A.E. Modified Taylor impact tests with profiled copper cylinders: experiment and optimization of dislocation plasticity model // *Materials*. – 2023. – V. 16. – P. 5602. <https://doi.org/10.3390/ma16165602>.

A3. Rodionov E.S., Mayer A.E., Estimation of dynamic yield stress by Taylor test with reduced cylindrical head part of samples // *Chelyabinsk Physical and Mathematical Journal*. – 2023. – V. 8(3). – P. 399–409. <https://doi.org/10.47475/2500-0101-2023-8-3-399-409>.

Тезисы в статьи в сборниках трудов и докладов международных и всероссийских конференций:

1. Е. С. Родионов, В. Г. Лупанов, Н. А. Грачёва, П. Н. Майер, А. Е. Майер, «Соударение профилированных медных цилиндров с жесткой стенкой: эксперимент и микроструктурный анализ» // *Забабахинские научные чтения: сборник материалов XV Международной конференции 27 сентября – 1 октября 2021*. – Снежинск: Издательство РФЯЦ – ВНИИТФ, 2021. – 138 с. ил.

2. Родионов Е.С., Лупанов В.Г., Грачева Н.А., Майер П.Н., Майер А.Е., «Соударение профилированных медных цилиндров с жесткой стенкой: эксперимент, микроструктурный анализ и моделирование» // *Перспективные материалы и технологии: материалы международного симпозиума, Минск, 23 - 27 августа 2021 г.* / под. ред. В.В. Рубаника - Минск: Белорусский государственный институт стандартизации и сертификации», 2021. – 375 с.

3. Родионов Е.С., Лупанов В.Г., Грачева Н.А., Майер П.Н., Майер А.Е., «Соударение профилированных медных цилиндров с жесткой стенкой: эксперимент и микроструктурный анализ» // *Труды 64-й Всероссийской научной конференции МФТИ. 29 ноября – 03 декабря 2021. Фундаментальная и прикладная физика / сост.: К.С. Слободчук, А.В. Гец; Московский физико-технический институт (НИУ). — Москва–Долгопрудный-Жуковский: МФТИ, 2021. – 432 с.*

4. Родионов Е.С., Лупанов В.Г., Грачёва Н.А., Майер П.Н., Майер А.Е., «Соударение профилированных медных цилиндров с жесткой стенкой: эксперимент,

микроструктурный анализ и 3d SPH моделирование» // Физическая мезомеханика материалов. Физические принципы формирования многоуровневой структуры и механизмы нелинейного поведения: Тезисы докладов международной конференции, 5-8 сентября 2022 г., Томск, Россия / Ин-т физики прочности и материаловедения СО РАН. – Новосибирск: ИПЦ НГУ, 2022. – 193 с.

Список литературы:

1. Taylor G.I. The use of flat-ended projectiles for determining dynamic yield stress. I. Theoretical considerations // Proc. R. Soc. London, Ser. – A. – 194 (1038) – 1948. – P. 289–299. <https://doi.org/10.1098/rspa.1948.0081>.
2. Whiffin A.C. The use of flat-ended projectiles for determining dynamic yield stress. II. Tests on various metallic materials // Proc. R. Soc. London, Ser. – A. – 194 (1038) – 1948. – P. 300–322. <https://doi.org/10.1098/rspa.1948.0082>.
3. Carrington W.E., Gayler M.L.V. The use of flat-ended projectiles for determining dynamic yield stress III. Changes in microstructure caused by deformation under impact at high-striking velocities // Proc. R. Soc. London, Ser. – A. – 194 (1038) – 1948. – P. 323–331. <https://doi.org/10.1098/rspa.1948.0083>.
4. Moćko W., Janiszewski J., Radziejewska J., Grazka M. Analysis of deformation history and damage initiation for 6082-T6 aluminium alloy loaded at classic and symmetric Taylor impact test conditions // Int. J. Impact. Eng. – 75 – 2015. – P. 203–213. <http://dx.doi.org/10.1016/j.ijimpeng.2014.08.015>.
5. Rodionov E.S., Lupanov V.G., Gracheva N.A., Mayer P.N., Mayer A.E. Taylor impact tests with copper cylinders: experiments, microstructural analysis and 3D SPH modeling with dislocation plasticity and md-informed artificial neural network as Equation of State // Metals. – 2022. – V.12. – P. 264. <https://doi.org/10.3390/met12020264>.
6. Zelepugin S.A., Pakhnutova N.V., Shkoda O.A., Boyangin E.N. Experimental study of the microhardness and microstructure of a copper specimen using the Taylor impact test // Metals. – 2022. – V.12. – P. 2186. <https://doi.org/10.3390/met12122186>.
7. Xu J., Liu Q., Xu Y.F., Guo S.H., Li C., Zhang N.B., Cai Y., Liu X.Y., Lu L., Luo S.N. Taylor impact of high-entropy alloy Al_{0.1}CoCrFeNi: Dynamic severe plastic deformation and bulk gradient structure // J. Alloys Compd. – 2023. – P. 936. – 168261. <https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2022.168261>.
8. Lim H., Battaile C.C., Brown J.L., Weinberger C.R. Physically-based strength model of tantalum incorporating effects of temperature, strain rate and pressure // Model. Simul. Mater. Sci. Eng. – 2016. – V.24. – P. 055018. <https://doi.org/10.1088/0965-0393/24/5/055018>.
9. Piao M.J., Huh H., Lee I., Park L. Characterization of hardening behaviors of 4130 Steel, OFHC Copper, Ti6Al4V alloy considering ultra-high strain rates and high temperatures // Int. J. Mech. Sci. – 2017. – P. 131–132. – 1117–1129. <http://dx.doi.org/10.1016/j.ijmecsci.2017.08.013>.

10. Rivera D., Bernstein J., Schmidt K., Muyskens A., Nelms M., Barton N., Kupresanin A., Florando J. Bayesian calibration of strength model parameters from Taylor impact data // *Comput. Mater. Sci.* – 2022. – V.210. – 110999. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2021.110999>.
11. Bragov A., Lomunov A., Konstantinov A., Kruszka L., Proud B., Identification and verification of some plasticity models for structural materials by using pressure bar technique // *Conference series* – 2010.
12. Tohme T., Vanslette K., Youcef-Toumi K., A generalized Bayesian approach to model calibration // *Reliability Engineering & System Safety.* – V. 204. – 2020. – 107141. – ISSN 0951-8320, <https://doi.org/10.1016/j.ress.2020.107141>.
13. Walters D.J., Biswas A., Lawrence E.C., Francom D.C., Luscher D.J., Fredenburg D.A., Moran K.R., Sweeney C.M., Sand-berg R.L., Ahrens J.P., et al. Bayesian calibration of strength parameters using hydrocode simulations of symmetric impact shock experiments of Al-5083 // *J. Appl. Phys.* – 2018. – V.124. – 205105. <https://doi.org/10.1063/1.5051442>.
14. Nguyen T., Fensin S.J., Luscher D.J. Dynamic crystal plasticity modeling of single crystal tantalum and validation using Taylor cylinder impact tests // *Int. J. Plast.* – 2021. – V. 139. – 102940. <https://doi.org/10.1016/j.ijplas.2021.102940>.
15. Sjue S., Ahrens J., Biswas A., Francom D., Lawrence E., Luscher D., Walters D. Fast strength model characterization using Bayesian statistics // *AIP Conf. Proc.* – 2020. – 2272. – 70043. <https://doi.org/10.1063/12.0000882>.
16. Preston D.L., Tonks D.L., Wallace D.C. Model of plastic deformation for extreme loading conditions // *J. Appl. Phys.* – 2003. – V.93 – (1). – P. 211–220. <https://doi.org/10.1063/1.1524706>.
17. Krasnikov V.S., Mayer A.E., Yalovets A.P. Dislocation based high-rate plasticity model and its application to plate-impact and ultra-short electron irradiation simulations // *Int. J. Plast.* – 2011. – V. 27. – P. 1294–1308. <https://doi.org/10.1016/j.ijplas.2011.02.008>.
18. Mayer A.E., Khishchenko K.V., Levashov P.R., Mayer P.N. Modeling of plasticity and fracture of metals at shock loading // *J. Appl. Phys.* – 2013. – V. 113. – 93508. <http://doi.org/10.1063/1.4805713>.
19. Mayer A.E. Dynamic shear and tensile strength of iron: Continual and atomistic simulation // *Mech. Solids.* – 2014. – V. 49. – P. 649-656. <https://doi.org/10.3103/S0025654414060065>.
20. Borodin E.N., Mayer A.E. Structural model of mechanical twinning and its application for modeling of the severe plastic deformation of copper rods in Taylor impact tests // *Int. J. Plast.* – 2015. – V. 74. – P. 141–157. <http://doi.org/10.1016/j.ijplas.2015.06.006>.
21. Khishchenko K.V., Mayer A.E. High- and low-entropy layers in solids behind shock and ramp compression waves // *Int. J. Mech. Sci.* – 2021. – V. 189. – 105971. <https://doi.org/10.1016/j.ijmecsci.2020.105971>.
22. Gnyusov S.F., Rotshtein V.P., Mayer A.E., Rostov V.V., Gunin A.V., Khishchenko K.V., Levashov P.R. Simulation and experimental investigation of the spall fracture of 304L

stainless steel irradiated by a nanosecond relativistic high-current electron beam // *Int. J. Fract.* – 2016. – V. 199. – P. 59–70. <https://doi.org/10.1007/s10704-016-0088-8>.

23. Kanel G.I., Savinykh A.S., Garkushin G.V., Razorenov S.V. Effects of temperature and strain on the resistance to high-rate deformation of copper in shock waves // *J. Appl. Phys.* – 2020. – V. 128. – 115901. <https://doi.org/10.1063/5.0021212>.

24. Follansbee P., Regazzoni G., Kocks U. The transition to drag-controlled deformation in copper at high strain rates // *Inst. Phys. Conf. Ser.* – 1984. – V. 70. – P. 71–80

25. Lea L.J., Jardine A.P. Characterisation of high-rate plasticity in the uniaxial deformation of high purity copper at elevated temperatures // *Int. J. Plast.* – 2018. – V. 102. – P. 41–52. <https://doi.org/10.1016/j.ijplas.2017.11.006>.

26. Mironov S., Ozerov M., Kalinenko A., Stepanov N., Salishchev G., Zhrebtsov S., Plekhov O., Sikhamov R., Ventzke V., Kashaev N., et al. On the relationship between microstructure and residual stress in laser-shock-peened Ti-6Al-4V // *J. Alloys Compd.* – 2022. – V. 900. – 163383. <https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2021.163383>.