

Федеральное государственное бюджетное
образовательное учреждение высшего образования
«Челябинский государственный университет»

Латыпов Фаниль Таярович

**ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ДЕФОРМАЦИИ ПОРИСТЫХ
МЕТАЛЛОВ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МОЛЕКУЛЯРНО-
ДИНАМИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ И МАШИННОГО
ОБУЧЕНИЯ**

Специальность 1.3.3. Теоретическая физика

Диссертация на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Научный руководитель:

Доктор физико-математических наук, доцент
Майер Александр Евгеньевич

Челябинск, 2022

Оглавление

ВВЕДЕНИЕ.....	3
Глава 1. Пористые металлы и машинное обучение	10
1.1. Пористые металлы	10
1.2. Методы производства металлических пен.....	11
1.3. Поведение металлических пен при деформации.....	13
1.4. Модели механического поведения пористых металлов	16
1.5. Молекулярно-динамическое (МД) моделирование	19
1.6. Машинное обучение	23
1.7. Искусственные нейронные сети	26
1.8. Байесовский подход.....	31
Вывод по первой главе.	32
Глава 2. МД исследование деформации пористых металлов	34
2.1. Постановка задачи.....	34
2.2. Результаты МД исследований пористой меди	38
2.4 МД исследование пористого алюминия.	44
2.5 МД исследование пористого магния.....	56
Выводы по второй главе.....	68
Глава 3. Континуальное моделирование и машинное обучение	70
3.1 Структура искусственной нейронной сети и процедура обучения	70
3.2 Результаты аппроксимации деформационного поведения нанопористого алюминия и магния искусственной нейронной сетью	73
3.3. Микромеханическая модель.....	77
3.4. Байесовская идентификация параметров и сравнение результатов микромеханической модели и МД данных сжатия пористого алюминия	85
3.5. Сравнение результатов континуального и МД моделирования сжатия и растяжения пористой меди	88
Вывод по третьей главе	94
Глава 4. Ударные волны в нанопористом металле	95
4.1. Континуальное моделирование прохождения ударной волны в пористом металле	95
4.2. МД моделирование ударно-волнового нагружения пористого металла.....	97
4.3. Сравнение результатов моделирования распространения ударной волны в пористом металле на основе двух подходов машинного обучения	98
Вывод по четвертой главе	104
Заключение	105

ВВЕДЕНИЕ

Актуальность темы. Пористые металлы при меньшем весе по сравнению со сплошным материалом обладают свойством более эффективного поглощения энергии удара. С одной стороны, поры могут быть специально созданы [1,2] в металле, например методом вспенивания [3, 4], напылением паров металла на ячеистую заготовку, литьем по выплавляемым моделям на основе 3Д печати [5], с другой стороны, поры неизбежно присутствуют в металлических изделиях. Исследование деформации пористых металлов является важной задачей в связи с их применением в различных конструкциях. Существенное внимание уделяется созданию моделей механического отклика пористых металлов, как с помощью усредненных макроскопических подходов [6-9] так и на основе моделирования микроструктуры [10-13]. Одной из ключевых проблем является гомогенизация, то есть переход от пространственно неоднородной микроструктуры пористого металла к описывающему его усредненному континууму. Например, методы атомистического моделирования эффективны при исследовании представительных объемов нанопористых металлов, но ограничены малыми пространственными и временными масштабами. Для преодоления этих ограничений может использоваться континуальный уровень описания, на который переносится информация с атомистического уровня

Искусственные нейронные сети (ИНС), представляется перспективным для описания сложного механического поведения пористого материала. Нейронная сеть — очень гибкий инструмент [14] с большим количеством подгоночных параметров, которые представляют собой веса и смещения искусственных нейронов; но он не включает никакой априорной информации о рассматриваемом физическом процессе, а лишь воспроизводит тенденции в данных. Обучение ИНС по результатам МД может решить проблему гомогенизации, т.к. обучение может производиться на репрезентативном

объеме пористой среды отражающей усредненные характеристики влияния микроструктуры ячеек. А затем полученное определяющее уравнение на основе ИНС использоваться в макроскопическом континуальном моделировании. Другой парадигмой машинного обучения является использование физической модели с автоматической подгонкой параметров модели по большому массиву эталонных данных статистическим методом байеса [15-17]. В этом случае физическая модель содержит информацию о происходящих процессах и сокращает количество подбираемых параметров по сравнению с ИНС. Актуальным является применение этих двух подходов машинного обучения, ИНС и байесовской идентификации, для описания механического поведения пористого алюминия, а также сравнение эффективности этих подходов.

Настоящая работа посвящена моделированию сжатия пористых металлов тремя методами. Молекулярно динамическое (МД) моделирование проводится для исследования физики схлопывания пор и получения эталонных данных, которые применяются для обучения ИНС и параметризации микромеханической модели. Затем обученная ИНС и параметризованная модель применяются в качестве определяющих уравнений нанопористых металлов в макроскопическом моделировании прохождения ударной волны в пористом алюминии и магнии. Также в работе развивается микромеханическая модель схлопывания пор различной формы в металле.

Цель диссертационной работы – разработка теоретической модели поведения пористой среды при динамических воздействиях на основе применения машинного обучения.

Задачи диссертационной работы:

1. При помощи МД моделирования исследовать влияние пор различных форм и размеров на поведение материала при динамическом

нагружении, а также сформировать наборы данных (зависимости напряжений, пористости, плотности дислокаций от деформации);

2. Исследовать возможность применения ИНС для аппроксимации полученных результатов МД моделирования;

3. Развить микромеханическую модель динамической деформации пористых металлов и методы ее обучения на основе байесовского подхода с использованием данных МД моделирования.

4. Исследовать распространение ударной волны в пористом металле, используя ИНС или микромеханическую модель в качестве определяющего уравнения для элементов среды.

5. Сравнить два теоретических подхода на основе машинного обучения, искусственную нейронную сеть и микромеханическую модель с автоматизированным подбором параметров, для описания механических свойств пористых металлов.

Методы исследования. В работе применен двухуровневый подход к исследованию механического поведения пористых металлов при динамической деформации. На микроскопическом уровне с помощью метода молекулярной динамики (МД) исследовано воздействие на пористый металл высокоскоростной деформации сжатия. Рассчитаны кривые напряжение-деформация, пористость-деформация и плотность дислокаций-деформация при различных размерах пор, скоростях деформации и температурах. В случае алюминия исследованы различные формы пор (сферическая, цилиндрическая и кубическая). МД моделирование проводилось с применением широко используемого в научных исследованиях пакета LAMMPS и хорошо протестированных потенциалов межатомного взаимодействия типа погруженного атома (EAM).

Большие наборы данных, полученные при МД моделировании, использовались для обучения искусственной нейронной сети (подбора параметров для минимизации отклонения от обучающих данных). При

помощи ИНС построено определяющее уравнение, описывающее зависимости компонент тензора напряжения от компонент тензора деформации при различных температурах и скоростях деформации, включая стадии упругой и пластической деформации.

Также МД данные были использованы для определения параметров микромеханической модели при помощи автоматизированного подбора параметров на основе байесовского подхода.

На макроскопическом уровне (на масштабе мишени и ударника) проводилось моделирование распространения ударной волны в нанопористом алюминии и магнии с использованием уравнений механики сплошной среды. В качестве определяющего уравнения использовались либо ИНС, либо микромеханическая модель.

Научная новизна:

1. Впервые на основе данных МД показаны две новые особенности начала пластической деформации в нанопористом металле: 1) задержка между зарождением дислокационной полупетли на поверхности поры и испусканием дислокаций, запускающим пластическую релаксацию, 2) преимущественное образование дислокаций на округлых поверхностях по сравнению с плоскими.

2. Впервые сравниваются два теоретических подхода на основе машинного обучения, искусственная нейронная сеть (ИНС) и микромеханическая модель с автоматической байесовской идентификацией параметров, применительно к имитации деформационного поведения нанопористого алюминия.

3. Впервые разработанная ИНС и параметризованная микромеханическая модель применяются для моделирования распространения ударной волны в нанопористом алюминии и магнии в сравнении с прямым МД моделированием этого процесса. Впервые на основе этих трех теоретических подходов (ИНС, микромеханическая модель и прямое МД моделирование) исследована структура ударных волн разной

интенсивности в нанопористых металлах и показано наличие режимов с «запаздывающим» компактированием нанопор за фронтом ударной волны.

Практическая значимость Обученную ИНС и параметризованную модель можно в дальнейшем использовать в качестве определяющего уравнения в многомасштабной модели механического отклика нанопористых металлов при динамической деформации в макроскопическом моделировании.

Достоверность результатов. Точность и достоверность результатов представленных в работе, обусловлена использованием хорошо апробированного метода МД, реализующего его пакета программ LAMMPS, зарекомендовавшего себя в большом числе МД исследований, и апробированных потенциалов межатомного взаимодействия для генерации наборов обучающих данных, а также совпадением результатов, полученных по различным методикам (обученная ИНС или микромеханическая модель в сравнении с МД моделированием). Помимо этого, в работе показано соответствие откольной прочности меди, рассчитанной при МД моделировании, экспериментальным данным по отколу при воздействии ударных волн, генерируемых мощным короткоимпульсным лазерным облучением [18,19].

Личный вклад автора. В ходе выполнения научно-квалификационной работы автор принимал активное участие в формулировке целей и задач исследования, проводил численное моделирование, обработку и анализ полученных данных. Автором выполнено МД моделирование деформации пористых металлов и анализ полученных данных; эта часть работы проводилась совместно с Красниковым В.С. Блок работ по обучению искусственной нейронной сети на основе полученных МД результатов выполнялся совместно с Фоминым В.Е. Развитие микромеханической модели сжатия нанопористой среды проводилось совместно с Майером А.Е. Во всех этих подзадачах вклад автора был существенным либо определяющим, что позволяет представить соответствующие результаты к защите. Также

автором реализован численный алгоритм на основе уравнений механики сплошных сред с использованием либо ИНС, либо параметризованной микромеханической модели как определяющего уравнения для расчета поведения ударной волны в нанопористом металле. Автор участвовал в подготовке результатов исследования к публикации и представлял их на научных конференциях.

Положения и результаты, выносимые на защиту.

1. Концентрация напряжений вблизи пор приводит к следующим особенностям начала пластической деформации в нанопористом металле: преимущественное образование дислокаций на округлых поверхностях по сравнению с плоскими и задержка между зарождением дислокационной полупетли на поверхности поры и испусканием дислокаций с поверхности, запускающим пластическую релаксацию.

2. Теоретический подход к описанию ударно-волновых процессов в нанопористом металле, состоящий в применении в качестве определяющего уравнения искусственной нейронной сети, обученной по результатам молекулярно-динамического моделирования упругопластической деформации репрезентативных объемов. Искусственная нейронная сеть может использоваться для описания как упругой, так и пластической стадии деформации сжатия пористого металла.

3. Микромеханическая модель динамической деформации нанопористого металла на основе дифференциальных по времени уравнений, описывающих изменение размеров пор и упругопластическую деформацию окружающего материала, с параметрами, подбираемыми статистическим методом Байеса по результатам молекулярно-динамического моделирования.

4. Результаты сравнения двух развитых теоретических подходов с результатами прямого молекулярно-динамического моделирования распространения ударной волны в нанопористом алюминии и магнии. Оба подхода адекватно описывают профиль ударной волны, как в упругом пределе, так и в случае пластического компактирования пор, включая режим

с «запаздывающим» компактированием за фронтом ударной волны. Точность искусственной нейронной сети выше, чем у микромеханической модели на основе дифференциальных по времени уравнений.

Апробация результатов работы.

Результаты исследований представлены на конференциях:

– XXIII Всероссийская школа-конференция молодых ученых и студентов «Математическое моделирование в естественных науках». Россия, г. Пермь, 2014. Устный доклад.

– XIX Зимняя школа по механике сплошных сред. Россия, г. Пермь, 2015. Стендовый доклад.

– XXX International Conference on «Interaction of intense energy fluxes with matter». Russia, Elbrus, 2015. Стендовый доклад.

– XXXI International Conference on «Equations of State for matter». Russia, Elbrus, 2016. Стендовый доклад.

– 30th Nordic Seminar on Computational Mechanics. Дания, Копенгаген, 2017. Устный доклад.

– XXXIII International Conference on «Equations of State for Matter». Russia, Elbrus, 2018. Стендовый доклад.

– XXIX Всероссийская школа-конференция «Математическое моделирование в естественных науках». Россия, г. Пермь, 2020. Устный доклад.

– Международная конференция «Математическое моделирование» в рамках 19-й Международной конференции «Авиация и космонавтика». Россия, г. Москва, 2020. Устный доклад.

– Международный симпозиум «Перспективные материалы и технологии». Беларусь, г. Минск, 2021. Устный доклад.

– «XXXVII Фортовская международная конференция по уравнениям состояния вещества». Россия, п. Эльбрус, 2022. Стендовый доклад.

–LXIV Международная конференция «Актуальные проблемы прочности». Россия, г. Екатеринбург, 2022. Устный доклад.

- Международная конференция «Физическая мезомеханика материалов. Физические принципы формирования многоуровневой структуры и механизмы нелинейного поведения». Россия, г.Томск, 2022. Устный доклад.

Публикации. Результаты исследований опубликованы в 4 статьях в журналах, входящих в систему цитирования Scopus и приравненных к рекомендованным ВАК Минобрнауки РФ. Так же имеется 8 тезисов докладов.

Структура и объем диссертации. Диссертационная работа состоит из введения, четырех глав, заключения, публикаций автора и списка литературы. Объем диссертации составляет 123 страницы, список цитируемой литературы содержит 141 источник.

Глава 1. Пористые металлы и машинное обучение

1.1. Пористые металлы

Металлические пены представляют собой легкие ячеистые материалы, способные эффективно поглощать энергию ударной волны, звука и вибрации, а так же имеющие привлекательные тепловые и электрические свойства. Все это обеспечивает преимущества в использовании металлических пен по сравнению с классическими материалами [20]. Металлические пены можно применять в качестве теплоизолирующих материалов, из-за их низкой теплопроводности [21]. Довольно важными характеристиками металлических пен является высокое отношение прочности к весу и большая деформация сжатия при постоянном напряжении [22]. Из-за их низкой плотности может быть достигнуто сильное снижение веса по отношению к такому же объему сплошных металлов. Эта особенность делает их применение очень интересным в промышленных областях, например: применение пористых металлов довольно перспективно

в транспортной отрасли из-за снижения веса деталей и хорошей способности поглощать энергию [23]. Благодаря своим уникальным свойствам они также могут найти применение в авиационной, оборонной, морской и строительной отраслях [24]. Металлические пены могут быть изготовлены из различных металлов, таких как алюминий, никель, титан, медь, магний или сталь [25]. Помимо технических устройств пористые металлы могут найти применение и в медицине, к примеру пористый магний вызывает интерес как один из перспективных материалов для каркаса костной ткани, поскольку свойства пористого магния близки к свойствам губчатого вещества кости [26].

Механическое поведение пористых металлов зависит от морфологии пористости, которая значительно влияет на свойства пены и на потенциальные возможности её применения. Металлические пены делят на пены с открытыми и закрытыми порами [27]. Другая классификация может быть сделана по области применения: в теплообменниках, фильтрах, опорах для катализаторов и глушителях пенометаллы играют функциональную роль, а конструкционные пены (поглотители энергии, несущие элементы) подвергаются внешней нагрузке. В целом свойства металлических пен зависят от металлургических аспектов (металл или сплав, из которых они изготовлены), морфологии обработки (тип пористости, открытая или закрытая), степени пористости, размера и формы пор. Поэтому актуальным является исследование формы пор и величины пористости.

1.2. Методы производства металлических пен

Основными методами производства пористых металлов являются: напыление паров металла или газообразных металлических соединений на ячеистую заготовку; вдувание газа в расплав жидкого металла или разложение газовыделяющих частиц в расплаве; также возможно создание пенометаллов из твердого металла в порошкообразном виде.

Перспективным методом производства металлических пен является 3Д печать. В работе [5] представлен гибкий и универсальный метод

производства металлических пен с открытыми порами, называемый «lost-PLA», который аналогичен литью по выплавляемым моделям, но в данном методе для создания 3D-модели используется биоразлагаемый полимер PLA вместо воска. Весь процесс сводится к следующим этапам: (1) построение модели в 3D CAD; (2) экспорт в CAM - программу для 3D-печати; (3) 3D-печать модели из PLA; (4) гипсовое литье по модели PLA; (5) сушка формы; (6) удаление PLA из гипса; (7) литье металла в гипсовую форму; (8) снятие гипса для получения пены. Пример изделий приведен на рис. 1.1.

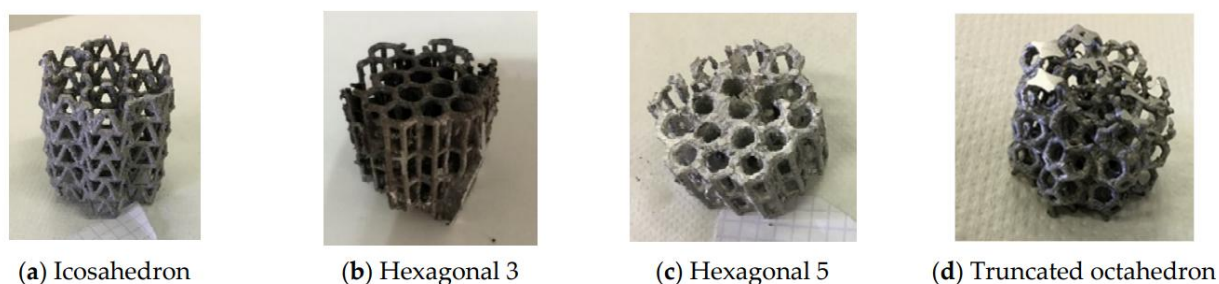


Рис. 1.1. Алюминиевые пены с открытыми порами: (а) икосаэдрический; (б) шестиугольный; (с) шестиугольный; (д) усеченный октаэдр. [5]

Основным преимуществом применения такого метода является возможность предварительного выбора размера и формы пор в готовой пене в зависимости от конечного применения и в соответствии с требуемыми характеристиками с использованием метода, который предлагает низкую стоимость и хорошую воспроизводимость.

Другой вариант метода литья по выплавляемым моделям для изготовления металлических пен с открытыми порами представлен в экспериментальной работе [28]. Вспененные маты из полиуретана с открытыми порами с различной плотностью заполняли гипсовой суспензией и после затвердевания формовочного материала, форма заливалась алюминиевым сплавом А356 (AlSi7Mg). После охлаждения и затвердевания формовочный материал удаляли с помощью химического растворителя с последующей гидроструйной обработкой.

Для пен с закрытыми порами в настоящее время существуют два основных метода производства. Один основан на прямом вспенивании жидкого металла, а другой основан на методах порошковой металлургии, т.е. на вспенивании твердых спрессованных заготовок из смеси металла и вспенивателя [3,4] как показано на рис. 1.2.

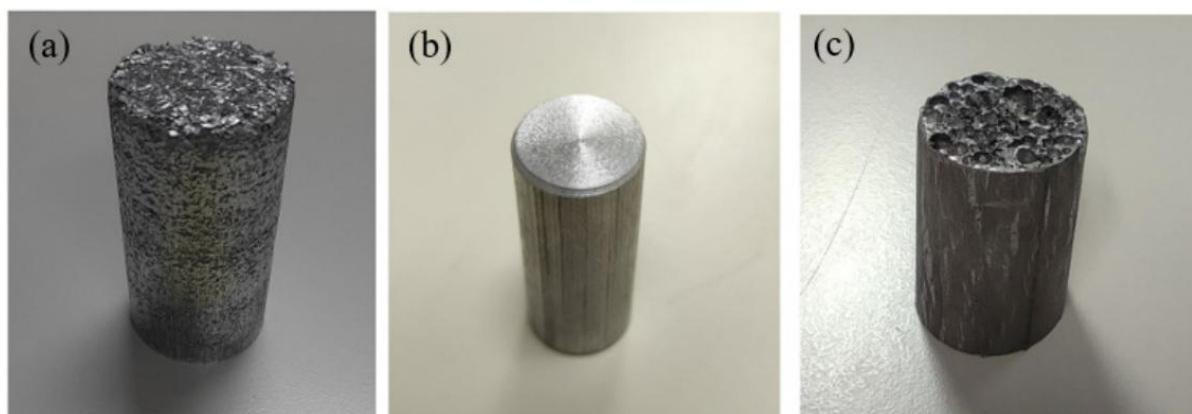


Рис. 1.2. Стадии производства металлической пены на основе металлической стружки [4]: а – заготовка, б – спрессованная заготовка, с – пористый металл после нагрева.

В [4] процесс создания пенометалла основан на вспенивании твердых спрессованных заготовок из отходов механической обработки алюминия. Заготовки производятся путем смешивания металлического порошка и порошка вспенивателя с последующим горячим прессованием или экструзией смеси. Завершающим этапом является вспенивание уплотненной заготовки путем контролируемого нагрева как минимум до температуры плавления металла или сплава [29]. Преимущество данного метода заключается в том, что заготовка может расширяться в нагретой форме, что позволяет получить вспененный образец сложной формы.

1.3. Поведение металлических пен при деформации

Одной из важных особенностей металлических пен является их способность поглощать энергию ударной волны при сжатии. Это связано с

длительной стадией деформации уплотнения металлической пены при почти постоянном уровне напряжения, что дает большую работу деформации.

На рис. 1.3 приведен график напряжение–деформация представленный в экспериментальной работе [28] где производилось квазистатическое и динамическое сжатие пористого металла с открытыми порами. Кривая напряжение-деформация имеет характерную для пористого металла форму, в которой можно выделить три области: (1) область перед плато указывает на начальный этап, демонстрирующий псевдоупругое поведение; (2) область плато на котором среднее напряжение остается постоянным, и полости начинают схлопываться; (3) область после плато, на котором уплотнение пены приводит к быстрому увеличению напряжения. На основе анализа площади под кривой можно заметить, что ячеистые материалы способны к высоким поглощениям энергии, как при статических, так и при динамических нагрузках. Авторы также указали, что даже при больших деформациях (более 80%) в направлении нагрузки поперечное расширение материала практически отсутствовало.

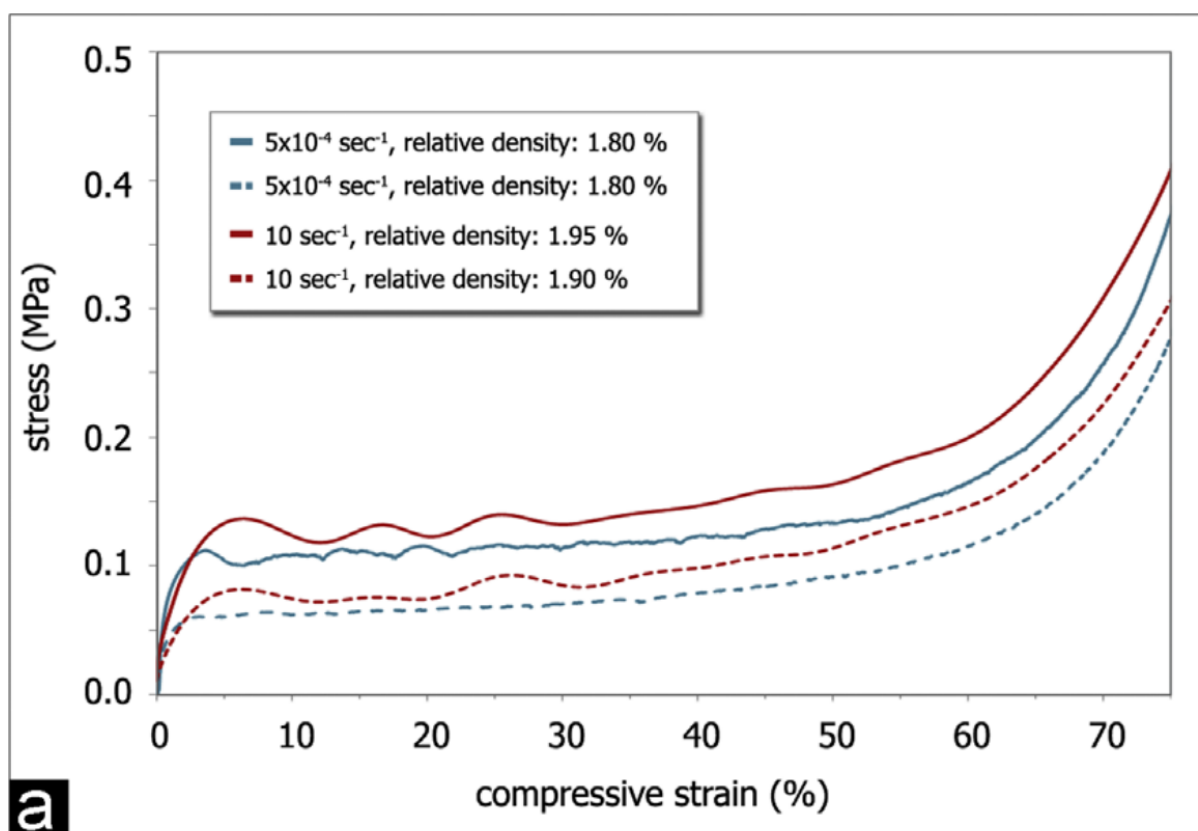


Рис. 1.3. Квazистатическая (синяя) и динамическая (красная) кривые напряжение-деформация пены из алюминиевого сплава А356 со структурой усеченного октаэдра при динамической и квазистатической нагрузке [28]. Показаны кривые с самым низким (штриховая) и самым высоким (сплошная) напряжением плато среди испытанных образцов.

Динамически испытанные образцы имеют более высокие напряжения плато (примерно на 27%) и немного меньшие деформации уплотнения (примерно на 8%). В работе было показано, что влияние скорости деформации на эволюцию кривых и деформацию на стадии уплотнения является слабым. Это позволяет проводить моделирование при более высоких скоростях деформации используя квазистатические данные.

В работе [30] синтезировали и описали пористый магний, где пора́ми являлись тонкостенные полые сферы из оксида алюминия. Авторы провели оценку влияния прочности матрицы и толщины стенки сферы на прочность на сжатие, напряжение на плато и эффективность поглощения энергии. Увеличение относительной толщины стенок пор приводит к значительному повышению прочности. Во всех случаях соотношение между прочностью на сжатие и прочностью на плато возрастало с увеличением прочности композита, но при этом приводило к снижению эффективности поглощения энергии.

Если говорить о пластической стадии деформации в пористом металле, то ее активация при механическом воздействии существенно зависит от наличия пустот в металлах. В работе [31] показано, что пустоты и трещины в металле стимулируют пластическую деформацию при растяжении металла. В экспериментах [32] наблюдалось образование дислокационных петель при пластической деформации вблизи свободной поверхности. Авторы [33] показали, что при распространении ударной волны умеренной амплитуды активируется коллапс пор, выражающийся в развитии пластического течения вблизи пор. Таким образом, процессы пластической деформации и роста или схлопывания полостей взаимосвязаны и требуют комплексного изучения.

Изменение объема пор возможно из-за эмиссии дислокаций с поверхности этих пор [34, 35]. Однако, по расчетам [33], обычный механизм испускания дислокаций порами (путем зарождения дислокации на свободной поверхности поры и последующего ее скольжения в кристалле) для многих материалов при квазистатическом нагружении требует преодоления значительного энергетического барьера. Поэтому действие такого механизма эффективно только в кристаллах при высокоскоростном ударном нагружении, при котором действуют чрезвычайно высокие сдвиговые напряжения [34], в то время как диффузия вакансий рассматривается в пределе низких скоростей деформации [36].

1.4. Модели механического поведения пористых металлов

В работе [37] было установлено, что характеристики прочности и энергопоглощения вспененного сплава с закрытыми порами могут быть улучшены за счет правильно подобранной микроструктуры. Целесообразно построение компьютерных моделей, которые связывают общую макроскопическую реакцию напряжения-деформации с пористой структурой.

Эффективность и характеристики пористых металлов надежнее всего устанавливаются эмпирически, но общепринятая методика механических испытаний является неэффективным способом исследования не только из-за длительности и трудоемкости, но и из-за сложности контроля влияющих факторов по отдельности при подготовке материала. Поэтому, численное моделирование основанное на моделях конечных элементов (КЭ), становится необходимым и мощным инструментом для выявления того, как конкретный фактор влияет на деформацию мезомасштабных ячеек, и изменяет макроскопические реакции металлической пены на напряжение-деформацию. При этом очень часто результаты численных моделей являются достаточно точными. Численное моделирование дает хорошее представление о взаимосвязи между макроскопическими механическими свойствами и лежащей в их основе микроскопической структурой.

В литературе существуют два основных подхода к вычислительному моделированию. Первый включает макроскопические подходы, которые используют феноменологические законы для описания механического поведения пористых металлов. В данном подходе металлическая пена рассматривается как континуум и используется определяющий закон для описания текучести материала в целом. Во всех этих моделях измеренные эмпирические данные используются для определения определяющих уравнений напрямую и влияют на точность определения деформации пены на макроуровне [6,7]. В работах [8,9] авторы так же использовали феноменологические макромоделли в сочетании с моделированием методом конечных элементов для вычисления деформации пенометаллов на макроскопическом масштабе. Однако в этих моделях должны использоваться феноменологические свойства материалов, которые явно не связаны с микроструктурными особенностями.

Второй подход фокусируется на моделировании микроструктуры (на уровне ячеек, при котором поведение пены выводится из ее микроструктуры и при котором рассматриваются физические механизмы на этом масштабе. С точки зрения задания микроструктуры такие модели можно разделить на три группы: (1) модели многогранников, заполняющих пространство, (2) модели, основанные на изображениях, и (iii) модели, основанные на мозаике. Из-за простоты их создания многие авторы использовали геометрию многогранника, заполняющего пространство (например, тетракаидекэдра), для представления стенок ячеек с целью изучения влияния морфологических особенностей на реакцию пены [10,11]. Эти модели дают представление о поведении пены, но сохраняют упрощения по отношению к сложной случайной геометрии реальной пены. Геометрически более точное описание для образца пенометалла можно получить с помощью рентгеновской компьютерной томографии [12,13,38]. Недостатком моделирования на основе компьютерной томографии является то, что достоверность результатов сводится к исследуемому образцу. Полная случайность в микроструктурных

особенностях не принимается во внимание, и тогда нельзя выделить индивидуальный вклад каждой геометрической особенности. Также используются модели на основе тесселяции Вороного [39,40] и мозаики Лагерра [41,42]. Они использовались для исследования влияния изменчивости микроструктуры на макроскопическое поведение пены, например, на неравномерность [40], вариации размеров клеток [41,42] и вариации толщины клеточных стенок [42]. В качестве иллюстрации в работе [41] использовали мозаику Лагерра с элементами оболочки для моделирования полимерных пен с закрытыми порами на основе реалистичных размеров ячеек и толщины стенок ячеек. Они заметили, что упругую жесткость пен с закрытыми порами можно предсказать с хорошей точностью. Тем не менее, при использовании моделей на основе тесселяции, даже если действительно учитывать часть вероятностных геометрических особенностей, некоторые характеристики отсутствуют по сравнению с реальными пенами. Например, стенки ячеек настоящего пористого материала искривлены, имеют неровности (изгибы, гофры), различаются по толщине и соединяются объемными краями.

Помимо искусственного создания пор в металлах их возникновение возможно и при механическом нагружении сплошных металлов, когда достигается предел упругости, возникает пластическое течение, приводящее к образованию большого количества дефектов решетки. В случае растяжения вещества впоследствии возникают и растут поры, которые образуются в основном в зонах повышенной дефектности. В последние десятилетия многие исследователи обращали свое внимание на проблему роста полостей, используя разные подходы, такие как модели кристаллической пластичности [33,35,43-47], теории пластичности с учетом градиента деформации [48-55], дискретной дислокационной динамики [56-60].

Во всех цитированных выше работах используется идея о том, что рост пустот происходит после выброса дислокации, когда достигается критическое напряжение сдвига. Увеличение пористости при разрушении

обычно учитывается на основе модели Гурсона или ее модификаций [61, 62], которые используют простые эмпирические модели пластичности, такие как идеальная пластичность. С другой стороны, пластическая деформация материала в окрестности пустот в динамических условиях не подчиняется какому-либо простому эмпирическому правилу, и необходима более физически обоснованная континуальная модель роста пустот. В работе [63] была предложена двухуровневая континуальная модель стимулированного дислокациями роста нанопор в алюминии, способная прогнозировать критическое растягивающее напряжение и использовать полученное уравнение для роста пустот в моделях разрушения [64]. Основываясь на молекулярно-динамическом моделировании, рост нанопор был связан с пластической деформацией в окрестности пор, вызванной зарождением дислокации с поверхности пор и приводящей к релаксации упругих напряжений.

Чтобы понять и, в конечном счете, контролировать макроскопическое механическое поведение пористого металла, необходимо исследовать механизмы деформации и разрушения пор на микро и макромасштабах. В настоящей работе предлагается многомасштабный подход, который объединяет исследования с помощью метода молекулярной динамики на микроуровне деформации репрезентативного элемента пористого металла с целью выявления усредненных характеристик. Далее полученные определяющие уравнения применяются на макроуровне для моделирования распространения ударной волны в пористом образце.

1.5. Молекулярно-динамическое (МД) моделирование

Для исследования поведения пористых металлов на микромасштабах хорошо подходят методы атомистического моделирования [63-75] реализованные в методе молекулярной динамики (МД), которая довольно активно используется для изучения механического поведения нанопористых металлов.

Развитие атомистических моделей поведения вещества позволило глубже понять процессы, лежащие в основе деформации металлов и сплавов. Согласно [63] рост нанопор может быть описан как результат атомных перестроек при испускании дислокаций с микроскопической точки зрения, так и релаксацией напряжений за счет сопутствующего пластического течения с континуальной точки зрения. Зарождение дислокаций и механизм коллапса пор, были изучены в работе [76] с помощью метода МД для случая нанопористого алюминия при ударном нагружении. В работе [77] методом МД было выявлено снижение прочности нанопористого монокристалла алюминия при переходе либо к сплюснутым, либо к вытянутым нанопорам по сравнению со случаем сферических пустот с учетом различных схем нагружения. В [78] авторы показали, что форма нанопор мало влияет на упругое поведение, но значительно влияет на предел прочности при растяжении сплава Mg и Mg-Al. Таким образом, можно заключить что молекулярно-динамическое моделирование довольно хорошо подходит для исследования деформации пористых структур. Поэтому рассмотрим данный метод более подробно.

Метод молекулярной динамики (МД) – позволяет исследовать атомные структуры и проследить эволюцию системы взаимодействующих атомов во времени с помощью интегрирования уравнений движений. При моделировании силы межатомного взаимодействия представляются в форме классических потенциальных сил (как градиент потенциальной энергии системы).

Пусть существует система из N частиц которые движутся в потенциальном поле сил U . В таком случае изменение положения частиц будет определяться их координатами \vec{r}_i и импульсами $\vec{p}_i = m_i \vec{v}_i$. Гамильтониан такой системы будет записываться как:

$$H(\vec{r}, \vec{p}) = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m} + \sum_{i < j} U(\vec{r}_{ij}), \quad (1.1)$$

Где $U = U(\vec{r}_i)$ - потенциальная функция, описывающая взаимодействие между частицами; p_i - импульсы частиц, m -массы частиц.

Продифференцировав выражение (1.1) по координатам и импульсам получим уравнения движения:

$$\frac{d\vec{r}_i}{dt} = \vec{v}_i, \quad (1.2)$$

$$m \frac{d\vec{v}_i}{dt} = \sum_j \vec{F}(\vec{r}_{ij}), \quad (1.3)$$

Где \vec{r}_i - положение частиц, \vec{v}_i - скорости частиц, $\vec{F}(\vec{r}_{ij})$ - сила действующая на частицы.

Чтобы проследить траектории частиц и исследовать эволюцию системы, нужно проинтегрировать уравнения движения. Интегрирование уравнений движения производится различными конечно-разностными методами. Но в основном применяется алгоритм Верле [79,80]. Классический алгоритм Верле является не самостартующим, поэтому на практике используют модифицированный алгоритм Верле – скоростной.

$$\vec{r}_i(t + \Delta t) = \vec{r}_i(t) + \vec{v}_i(t)\Delta t + \frac{1}{2}\vec{a}_i(t)\Delta t^2 \quad (1.4)$$

$$\vec{v}_i(t + \Delta t) = \vec{v}_i\left(t + \frac{\Delta t}{2}\right) + \frac{1}{2}\vec{a}_i(t + \Delta t)\Delta t \quad (1.5)$$

Определение макропараметров системы производится усреднением Гиббса по статистическому ансамблю.

$$\langle f \rangle = \frac{1}{K} \sum_{i=1}^K f_i \quad (1.8)$$

За короткий промежуток времени производится K измерений системы, затем рассматриваемая величина усредняется по времени.

Полученные координаты частиц $\vec{r}_i(t), \vec{p}_i(t)$ позволяют вычислить, как энергию системы:

$$E(t) = \frac{1}{2N} \sum_{i=1}^N m_i v_i^2(t) \quad (1.6)$$

так и давления через уравнение состояния

$$P = \frac{2N \langle E_k \rangle}{3V} + \frac{\langle U \rangle}{3V} \quad (1.7)$$

где V - объем системы.

В классической молекулярной динамике для определения сил взаимодействия частиц необходимо воспользоваться межатомным потенциалом. В случае металлов одним из наиболее точных является потенциал «погруженного атома» (Embedded Atom Model – EAM) [81]. Полная энергия системы включает два вклада – энергии парного взаимодействия атомов и энергии взаимодействия каждого атома с электронной плотностью, создаваемой другими атомами:

$$U(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_n) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{\substack{j=1 \\ (j \neq i)}}^N \varphi(r_{ij}) + \sum_{i=1}^N f(\rho_i) \quad (1.8)$$

где $\varphi(r_{ij})$ – парный потенциал, $f(\rho_i)$ – функция «погружения» i -го атома. Электронная плотность ρ_i для i -го атома определяется сферически

симметричными функциями одноэлектронной плотности $n_{ij}(r)$, описывающими вклад других атомов:

$$\rho_i = \sum_{j=1}^N n(r_{ij}) \quad (1.9)$$

Функции $\varphi(r_{ij})$, $f(\rho_i)$, $n_{ij}(r)$ рассчитываются с помощью аппроксимирующих формул с феноменологическими параметрами, определяемыми экспериментально или на основе квантовомеханической теории. Обычно функцию $\varphi(r_{ij})$ представляют в виде классических парных потенциалов или в виде полиномов n -го порядка. На основе квантовомеханической теории определяют электронные плотности $n_{ij}(r)$ для отдельных атомов. Из уравнения состояния определяют $f(\rho_i)$.

1.6. Машинное обучение

Прогнозирование поведения металлических пен при их деформациях является сложной задачей. Поэтому для аппроксимации сложных механических реакций пенометаллов, применение методов машинного обучения является очень перспективным. В настоящее время важным является разработка методик применения машинного обучения для анализа научных данных и сравнения их эффективности с традиционными явными моделями процессов.

Машинное обучение является подмножеством Искусственного Интеллекта. Оно определяется как использование компьютерных алгоритмов для автоматического выполнения конкретной задачи на основе опыта и данных. Другими словами, машинное обучение основано на изучении закономерностей и выводов из данных, с помощью которых после обучения возможно спрогнозировать поведение системы. Прогнозирование механического отклика металлов с использованием методов, основанных на

данных, таких как машинное обучение (Machine Learning) или глубокое обучение (Deep Learning), в последние годы вызвало огромный интерес. Подмножеством машинного обучения является глубокое обучение — область, посвященная использованию алгоритмов, которые индуктивно оценивают базовую функцию распределения данных путем анализа заданных примеров данных [82] с использованием искусственных нейронных сетей (ИНС). Благодаря использованию ИНС возможна универсальная аппроксимация практически произвольных функций [14]. Франкель и др. использовали гибридные сверточно-рекуррентные нейронные сети для прогнозирования механического отклика как двумерных поликристаллов [83], так и трехмерных олигокристаллов [84]. Гарланд с соавторами [85] использовали сверточные нейронные сети (CNN) для прогнозирования энергии деформации в различных структурах решетки материалов, произведенных аддитивными технологиями, используя только их оптические изображения. Херриот и Спир [86] использовали ИНС для прогнозирования эффективного предела текучести на основе трехмерных микроструктур. Канцос совместно с коллегами [87] использовали ИНС для прогнозирования концентрации напряжений, вызванных шероховатостью поверхности. Самосогласованный кластерный анализ (SCA) использовался для моделирования сложных микроструктурных морфологий, таких как столбчатые структуры зерен и эффекты пустотных кластеров [88]. Мозаффар и соавторы использовали глубокое обучение для прогнозирования пластичности, зависящей от пути деформации в алюминиевом сплаве [89]. Влассис совместно с коллегами недавно использовал методы глубокого обучения для прогнозирования поведения анизотропного гиперупругого материала при конечных деформациях [90].

Методы машинного обучения также довольно часто применяется исследователями для изучения пористых материалов. В работе [91] авторы изучили процентное содержание глинозема и объемную долю пор в керамических кеках Al_2O_3/SiC , данные результаты были получены при

помощи ИНС, которая обучалась методом градиентного спуска. В работе [92] ИНС была применена для моделирования механических свойств алюминиевой пены с закрытыми порами при сжатии, были получены напряжение плато, модуль Юнга и поглощенная энергия. Влияние пор и их размера на механизм деформации при статическом нагружении закрытой ячеистой пены из алюминиевого сплава AlSi17 были исследованы с помощью ИНС в [93]. В [94] исследователями проведена серия испытаний на изотермическое сжатие в интервале температур 400–540 °С и скоростей деформации 0,001–0,1 с⁻¹ для оценки высокотемпературных характеристик течения литого алюминиевого сплава А356, с последующим обобщением с помощью ИНС. В работе [95] авторы применили ИНС для аппроксимации данных МД об упругом поведении монокристаллов алюминия и меди, включая напряжение, модуль сдвига и обобщенные дефекты упаковки в зависимости от деформации, а затем использовали эти ИНС для прогнозирования зарождения дислокаций при сдвиге параллельно плоскости {111}. В [16,96] с помощью ИНС аппроксимировали нелинейную зависимость между напряжением и деформацией (тензорное уравнение состояния) и порог зарождения дислокаций, установленный из МД; в [96] также использовали обученные ИНС для моделирования распространения ударной волны в монокристаллическом алюминии в рамках механики сплошной среды.

На данный момент существует множество методов машинного обучения. Часто используемые алгоритмы машинного обучения включают: линейную регрессию, машины опорных векторов (SVM) [97], искусственную нейронную сеть (ANN) [98], логистическую регрессию (LR), дерево решений, случайный лес (RF) [99], наивный байесовский метод, k-ближайших соседей, и т. д.

В данной работе для описания деформационного поведения нанопористого металла была использована ИНС и байесовский подход для определения параметров микромеханической модели.

1.7. Искусственные нейронные сети

Нейронные сети представляют собой вычислительные графы (рис. 1.4), состоящие из слоев искусственных нейронов. Каждый искусственный нейрон принимает сумму взвешенных входных данных и обучаемого смещения от предыдущих нейронов или данных. Эта сумма используется в качестве входных данных для функции активации. Результирующее значение функции активации становится входом для другого нейрона из следующего слоя нейронов. В ИНС различают три типа слоев нейронов: входной слой, скрытые слои и выходной слой. Цель состоит в том, чтобы построить систему, которая может принимать вектор значений x на входе и предсказывать вектор значений y на выходе.

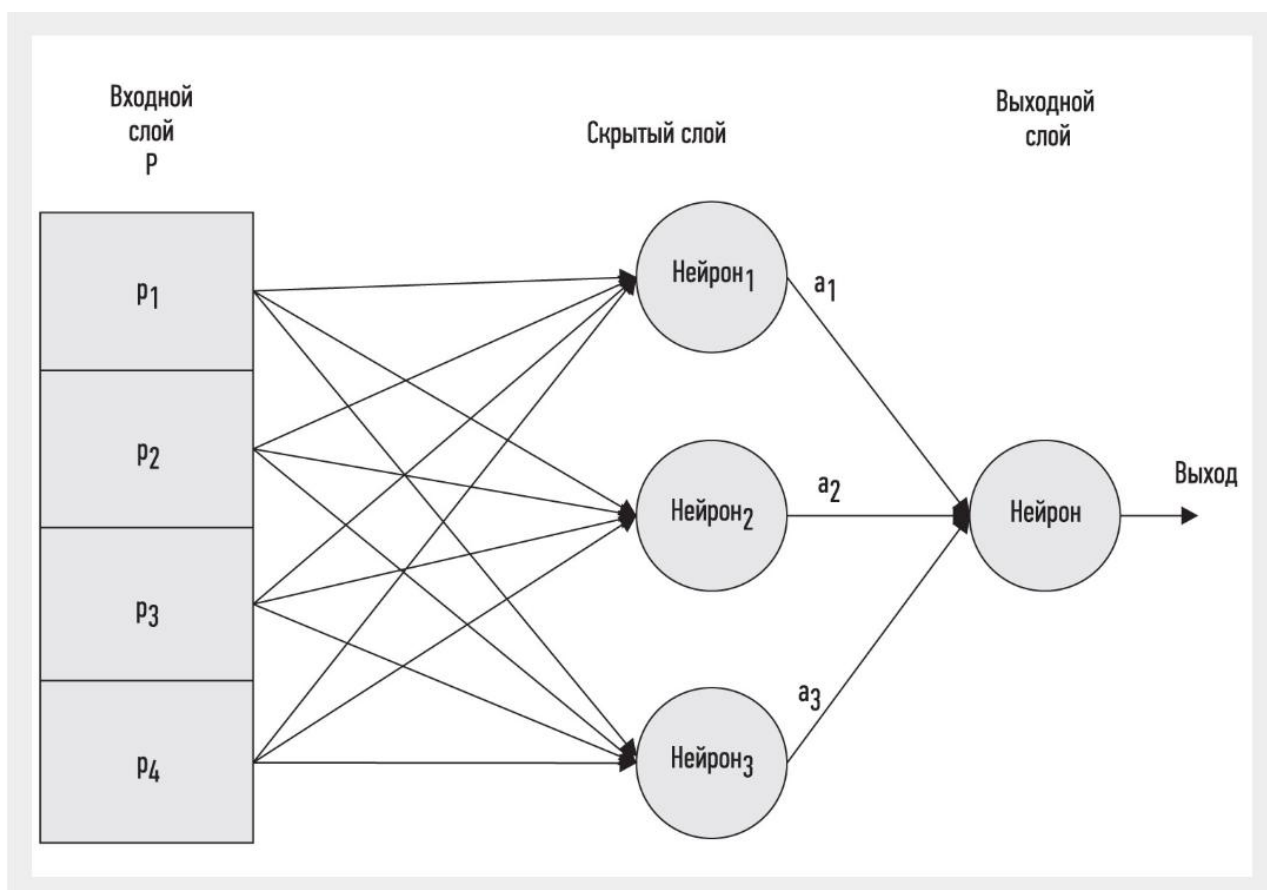


Рис. 1.4. Упрощенная схема искусственной нейронной сети. [100]

Каждый нейрон после получения сигналов производит обработку информации и посылает ее к следующим нейронам. Графическое

представление модели нейрона показано на рис. 1.5. В данной модели выделяют три элемента.

1. Связи с нейронами предыдущего слоя, каждая из которых имеет свой весовой коэффициент w_{jk} . Можно представить себе набор весов как коэффициентов, которые определяют, как каждая связь влияет на прогноз. Сигналы, поступающие из нейронов предыдущего слоя, умножаются на весовые коэффициенты и, если функция получает положительный вес w , то увеличение значения этой функции увеличивает значение нашего прогноза y . Если функция получает отрицательный вес, то увеличение значения этой функции уменьшает значение нашего прогноза. Если вес велик по величине, он оказывает большое влияние на прогноз. Если вес признака равен нулю, он не влияет на прогноз.

2. Сумматор. После произведения входных сигналов с коэффициентами производится суммирование этих произведений.

$$u_k = \sum_{j=1}^m w_{kj} x_j \quad (1.10)$$

где x_j – входные сигналы, w_{jk} – веса связей данного нейрона с предыдущими, u_k – результат работы сумматора.

3. Функция активации преобразовывает амплитуду выходного сигнала нейрона.

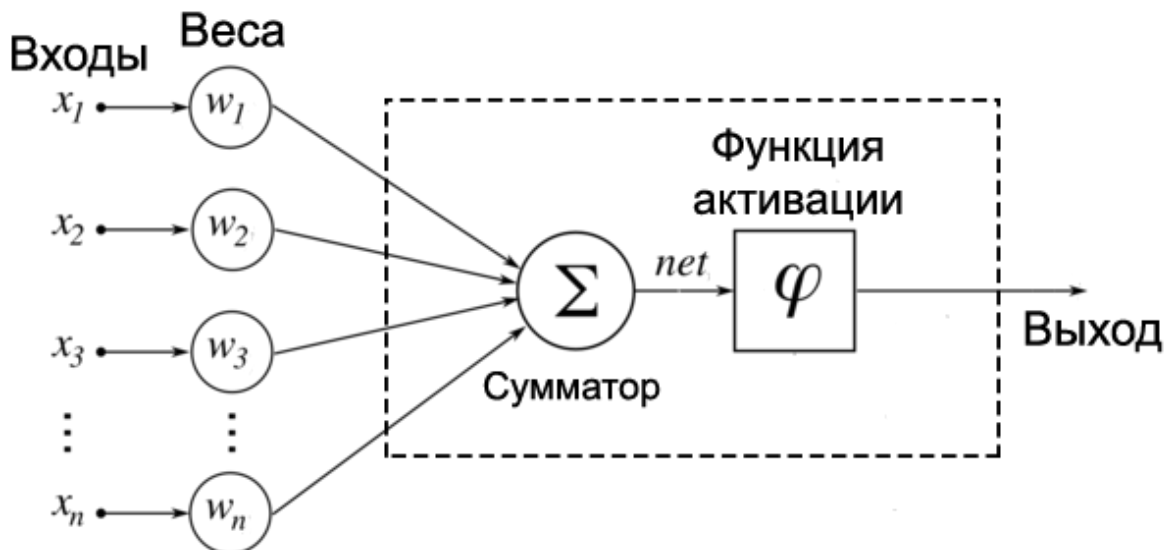


Рис. 1.5. Искусственный нейрон [101]

Помимо весовых коэффициентов в модели нейрона, присутствует коэффициент смещения, обычно данный коэффициент обозначается как b_k . Данная величина характеризует снижение или увеличение входного сигнала, который подается в функцию активации. Таким образом, сигнал нейрона k можно описать как:

$$y_k = \varphi(u_k + b_k) \quad (1.11)$$

или

$$y_k = \varphi\left(\sum_{j=1}^m w_{kj} x_j + b_k\right) \quad (1.12)$$

где b_k – коэффициент смещения, φ – функция активации y_k – выходной сигнал нейрона.

Функции активации $\varphi(v)$, изменяют значения выходного сигнала нейрона в зависимости от суммы произведений весовых коэффициентов и сигналов нейронов с предыдущего слоя.

Выделяют три основных типа функций активации:

1. Функция единичного скачка или пороговая функция (рис. 1.6 (а)).

$$\varphi(v) = \begin{cases} 1, & \text{если } v \geq 0; \\ 0, & \text{если } v < 0; \end{cases} \quad (1.13)$$

2. Кусочно–линейная функция показанная на рис. 1.6 (б) описывается следующим выражением:

$$\varphi(v) = \begin{cases} 1, & v \geq +\frac{1}{2}; \\ |v|, & +\frac{1}{2} > v > -\frac{1}{2}; \\ 0, & v \leq -\frac{1}{2}; \end{cases} \quad (1.14)$$

3. Сигмоидальная функция (рис. 1.6 (в))

$$\varphi(v) = \frac{1}{1 + \exp(-av)} \quad (1.15)$$

где a – параметр наклона сигмоидальной функции. Изменяя этот параметр можно построить функции с различной крутизной.

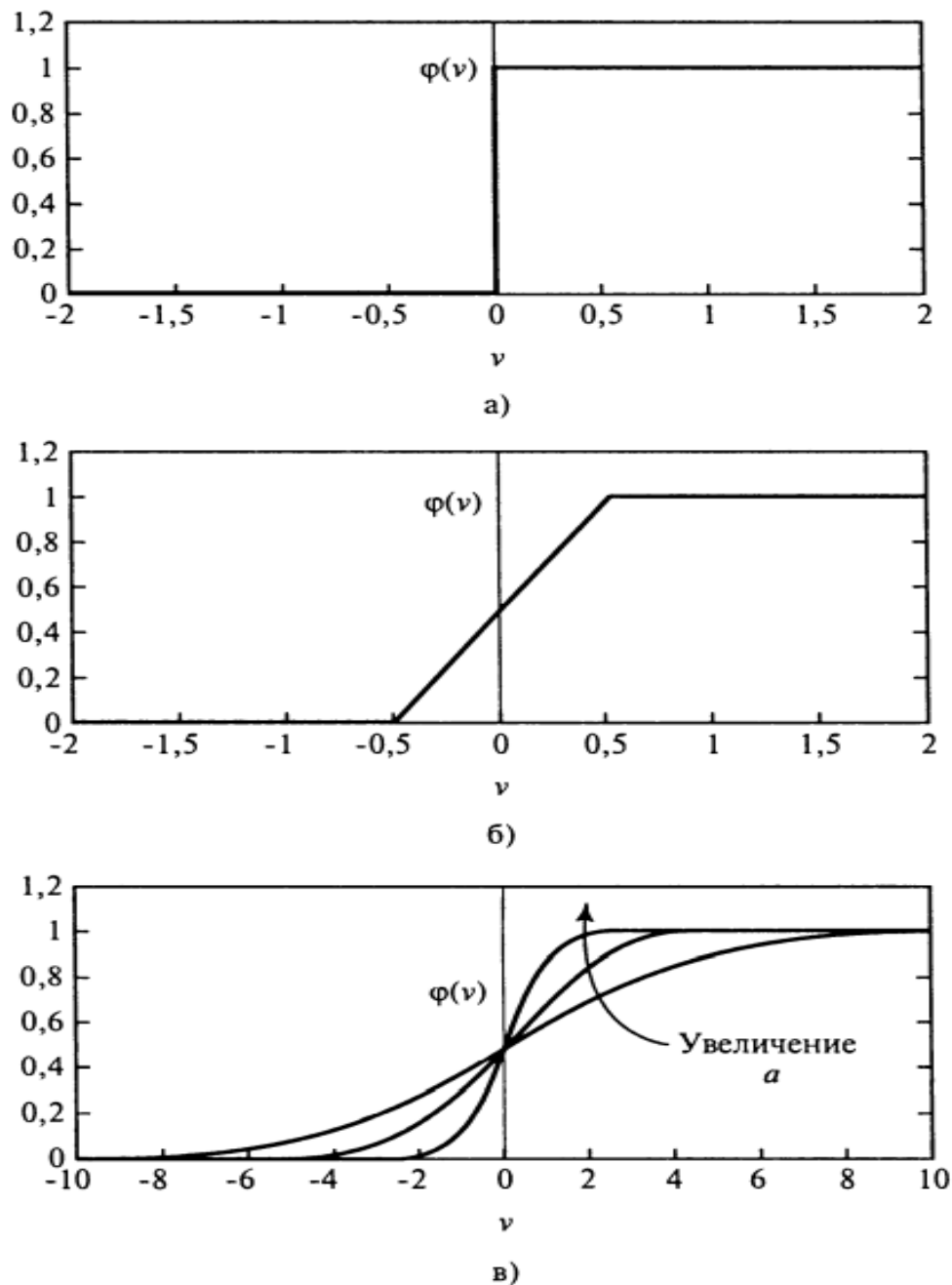


Рис. 1.6. Функции активации: пороговая функция (а); кусочно-линейная функция (б) и сигмоидальная функция (в). [102]

Для того чтобы ИНС выдавала верный прогноз необходимо произвести ее обучение. Обучение нейронной сети происходит посредством корректировки весовых коэффициентов и смещений.

Для того чтобы произвести корректировку коэффициентов вначале необходимо сравнить значения нейронов y_k , полученные на выходном слое,

с целевыми данными d_k . Ошибка нейронов выходного слоя представляется как:

$$e_k = d_k - y_k \quad (1.16)$$

После вычисления ошибки производится последовательность корректировок коэффициентов. Эти изменения нацелены на пошаговое приближение выходного сигнала y_k к целевому d_k . Цель достигается за счет минимизации функции стоимости или среднеквадратичной ошибки E

$$E = \frac{1}{2} e_k^2 \quad (1.17)$$

Обозначим $w_{kj}(n)$ текущее значение синаптического веса нейрона k , соответствующего элементу вектора $x_j(n)$, на шаге обучения n . Тогда изменение $\Delta w_{kj}(n)$, применяемое к синаптическому весу $w_{kj}(n)$ при обучении, задается выражением:

$$\Delta w_{kj}(n) = \eta e_k(n) x_j(n) \quad (1.18)$$

где η – некоторая положительная константа, определяющая скорость обучения.

Вычислив величину изменения веса $\Delta w_{kj}(n)$, можно определить его новое значение для следующего шага:

$$w_{kj}(n+1) = w_{kj}(n) + \Delta w_{kj}(n) \quad (1.19)$$

Корректировка коэффициентов нейронов продолжается до тех пор, пока среднеквадратичная ошибка не достигнет оптимального значения для данной задачи. В этой точке процесс обучения останавливается.

1.8. Байесовский подход

Другим подходом машинного обучения является метод Байеса для калибровки параметров модели. Его преимущество состоит в том, что метод

позволяет автоматически определить параметры модели и произвести раннее исключение наборов параметров модели, которые не обеспечивают согласие с эталонными данными [103].

В байесовской регрессии вместо предварительного формирования регрессии для изучения параметров модели выполняется регрессия для изучения апостериорного распределения вероятностей параметров модели. То есть оценивается набор параметров модели $M \equiv M(x, \vec{\alpha})$ для данных D (где x — входные данные модели). Определяющим уравнением байесовской регрессии является:

$$\rho(\vec{\alpha} | D, M) = \frac{\rho(D | \vec{\alpha}, M) \rho(\vec{\alpha} | M)}{\rho(D | M)} \quad (1.20)$$

где $\rho(\vec{\alpha} | D, M)$ – апостериорная вероятность параметров; $\rho(D | \vec{\alpha}, M)$ – функция правдоподобия; $\rho(\vec{\alpha} | M)$ – априорная вероятность; $\rho(D | M)$ – предельная вероятность.

Вывод по первой главе.

Присутствие дефектов, таких как поры, в металлах сильно влияют на поведение материала при его деформации. Пустоты в металлах стимулируют пластическую деформацию [17,107,108]. Помимо неизбежного присутствия таких дефектов они могут быть и искусственно созданы в материале. Разработка пористых металлов обусловлена хорошими демпфирующими свойствами пористых металлов, так как при прохождении ударной волны сквозь пористый материал происходит интенсивное уменьшение ее амплитуды. Сейчас активно развиваются аддитивные технологии, позволяющие создавать сложные структуры.

Пластическая деформация материала вблизи пустот в динамических условиях не подчиняется какому-либо простому эмпирическому закону и существенно зависит от наличия несплошностей в металлах. Таким образом,

процессы деформации пористых структур и разработка их определяющих уравнений требуют дальнейшего изучения и разработки.

Для изучения поведения пористых металлов при их деформациях хорошо подходят методы атомистического моделирования (метод молекулярной динамики). Метод МД широко используется при теоретическом исследовании ударно-волновых явлений в твердых телах. Помимо этого, методом МД активно исследуется влияние включений [104-107], полостей [63,108], границ зерен [109,110], двойников [111]. Поэтому для описания деформации пористых структур и набора эталонных данных для обучения ИНС и параметризации модели был применен метод молекулярной динамики.

В последнее время растет применение технологий машинного обучения для анализа данных. Благодаря взрывному росту вычислительных мощностей компьютеров многократно усложнились закономерности и прогнозы, создаваемые ими, и расширился круг проблем и задач, решаемых с использованием машинного обучения. Поэтому очень актуальным является использование их для прогнозирования сложного поведения пористых металлов при их деформировании.

Глава 2. МД исследование деформации пористых металлов

2.1. Постановка задачи

ГЦК металлы: медь и алюминий

В случае меди моделируемая система представляла собой монокристалл меди с гранецентрированной кубической решеткой длиной одной стороны 18 нм и содержала около полумиллиона атомов. Оси системы координат в большинстве случаев были ориентированы в кристаллографических направлениях $[100]$, $[010]$ и $[001]$ по x , y и z координатам. Периодические граничные условия были установлены для всех граней куба. Взаимодействие между атомами было описано с использованием потенциала ADP [112]. Шаг по времени во всех симуляциях составлял 1 фемтосекунду.

Температура во всех испытаниях поддерживалась постоянной со значениями 300, 500, 700, 900 или 1100 К с использованием термостата Нозе-Гувера. В центре моделируемой области с помощью команды «delete atoms» пакета LAMMPS [113] создавалась сферическая полость радиусом 1,87 нм, что соответствует пористости около 0,5%. Перед деформацией система релаксировалась в течение 2 пс при температуре испытания и нулевом давлении. Растяжение и сжатие прикладывались вдоль оси x с постоянной скоростью деформации 0,1, 1 и 10 нс⁻¹; такие условия нагружения соответствуют плоской ударной волне или волне растяжения, когда боковая разгрузка незначительна. Для температуры 300 К была рассмотрена более низкая скорость деформации, равная 0,01 нс⁻¹, что близко к типичным скоростям деформации, вызванным ударной волной.

В случае алюминия исследуемые МД системы представляют собой монокристалл алюминия размером 20x20x20 нм³ (длина ребра куба $L = 20$ нм), изначально содержащий полмиллиона атомов с вырезанной порой в центре системы. Рассматриваются различные формы (сферические, кубические и цилиндрические) и объемы пор (рис. 2.1). В случае сферической поры диаметр D составляет 4, 8 или 16 нм, что соответствует

начальной пористости около 0,4%, 3,3% или 27 %, соответственно. В случае кубической поры длины всех ребер составляют 4, 8 или 16 нм при начальной пористости 0,8 %, 6,4% или 51 % соответственно. В случае цилиндрических пор высота и диаметр равны друг другу и составляют 4, 8 или 16 нм при начальной пористости 0,6 %, 5% или 40 % соответственно. Таким образом, были рассмотрены пористости, варьирующиеся от уровня порядка 1% до очень высокого значения порядка (30-50)%. Наименьшая пористость соответствует дефектам, оставшимся после производства и обработки материала, а наибольшие пористости соответствуют искусственно созданной микроструктуре. Также для части температур проводились расчеты для пор размером 12 нм в качестве валидационных данных. При моделировании МД пора вырезается с помощью команды «delete atoms» пакета LAMMPS [113]; таким образом, кристаллическая структура материала вокруг поры остается неизменной. Температура во всех симуляциях постоянна со значениями 300, 500, 700 или 900 К; термостат Нозе-Гувера [114] используется для поддержания постоянной температуры. Деформация задается командой LAMMPS «erate», которая изменяет размер системы, перемасштабируя положения всех атомов с постоянной инженерной скоростью деформации. Применяется как одноосное, так и всестороннее (объемное) сжатие с инженерной скоростью деформации 1 нс^{-1} . Несмотря на формально сверхвысокое значение этой скорости деформации, она близка к квазистационарному уровню для наноструктурных материалов, как показано в работах [17,115], что объясняется коротким временем пластической релаксации для таких наноструктур с малым пространственным масштабом. В случае системы со сферическими или кубическими порами одноосное сжатие осуществляется только вдоль направления решетки [100], а в случае цилиндрической поры одноосное сжатие осуществляется как по кристаллографическим направлениям [100], так и по [010]. что соответствует осям координат x и y .

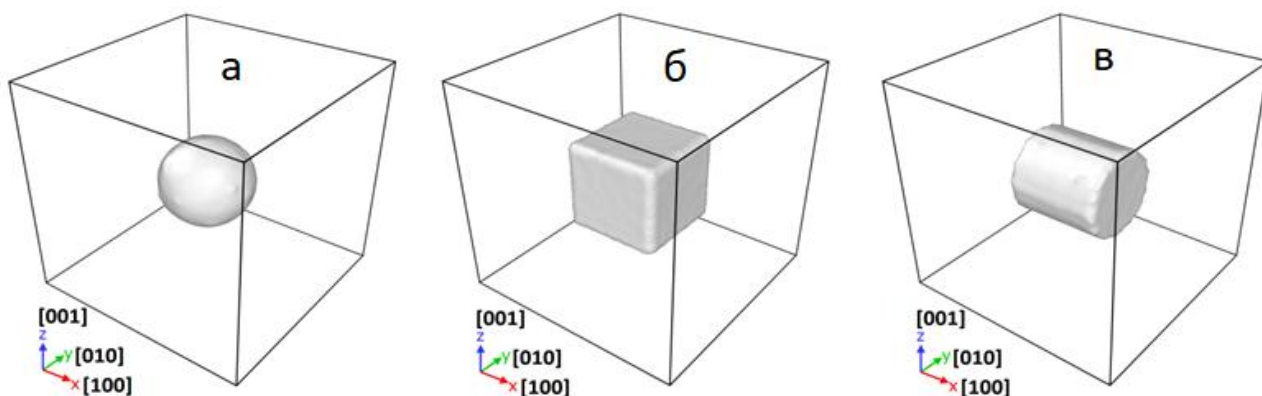


Рис. 2.1. Исходное состояние МД-систем с порами различной формы размером 8 нм: (а) сферическая пора, (б) кубическая пора и (в) цилиндрическая пора. МД системы визуализированы с помощью программы OVITO [116]; поверхность пор показана при помощи алгоритма “Construct surface mesh” [117].

Для всех граней МД системы задавались периодические граничные условия. Взаимодействие между атомами описывается с помощью потенциала погруженного атома ADP [112]. Перед деформацией система релаксирует в течение 10 пс при температуре испытания и нулевом давлении, контролируемом баростатом Нозе-Гувера [114].

ГПУ металл Магний

Рассматривались системы со сторонами 20x20x20 периодов решетки. Размер сферических пор варьировался и составлял 4, 8, 16 и 20 нм. Температура задавалась постоянной со значениями 300, 500 и 700 К, для поддержания постоянной температуры используется термостат Нозе-Гувера [114]. Деформация задается командой «erate» которая изменяет размер системы, перемасштабируя положения атомов в системе. Сферическая полость с заданным радиусом вырезается в центре моделируемой области с помощью команды «delete atoms» пакета LAMMPS [113].

Периодические граничные условия применялись для всех граней куба. Взаимодействие между атомами было описано с использованием потенциала ADP [118]. Было исследовано как одноосное, так и всестороннее сжатие.

Перед деформацией система релаксировала в течение 10 пс при температуре испытания и нулевом давлении.

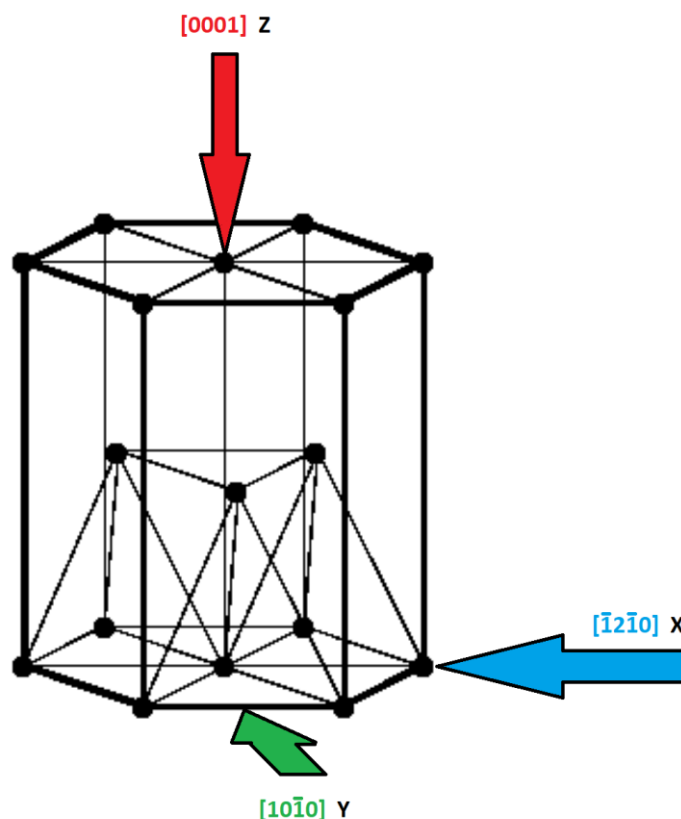


Рис. 2.2. Схема сжатия по кристаллографическим направлениям в ГПУ решетке магния.

Исследованные одноосные направления сжатия x , y и z показаны на рис. 2.2 что соответствует кристаллографическим направлениям в ГПУ решетке $[\bar{1}2\bar{1}0]$, $[10\bar{1}0]$ и $[0001]$. Всестороннее сжатие производилось по всем трем направлениям одновременно.

Во всех случаях численных экспериментов (медь, алюминий, магний) для моделирования с помощью метода молекулярной динамики использовался программный пакет LAMMPS [113]. Анализ и визуализация полученных атомных распределений проводились с использованием пакета OVITO [116]. Дефектные структуры в полученных из МД атомных конфигурациях идентифицировались при помощи центрально-симметричного параметра [105], анализом соседних атомов (CNA) [119,120]

и алгоритмом извлечения дислокаций (DXA) [120], реализованными в программе OVITO.

2.2. Результаты МД исследований пористой меди

Верификация межатомного потенциала

В настоящее время разработано несколько межатомных потенциалов для меди. Потенциал ADP [112] дал надежные результаты во многих численных экспериментах. Адекватность результатов, полученных с помощью ADP-потенциала, была проверена нами оп величине прочности на растяжение идеальной решетки по сравнению с экспериментальными результатами, представленными в [18,19]. В этой экспериментальной работе тонкие пленки меди облучались мощными ультракороткими лазерными импульсами с записью профилей скорости задней поверхности, зарегистрированных с помощью лазерной интерферометрии. Скорость деформации до $0,5 \text{ нс}^{-1}$, реализуемая в таких экспериментах, непосредственно достижима при МД моделировании. Прочность на растяжение в МД моделировании рассчитывается как максимальное растягивающее напряжение, достигаемое в сплошном или пористом образце во время растяжения. Этот максимум соответствует моменту, когда скорость роста объема пустот превышает скорость роста объема образца. Сравнение результатов МД и экспериментальных данных представлено на рис. 2.3, как для сплошных образцов, так и образцов с порами. Как видно из рис. 2.3, результаты, полученные при моделировании МД для чистой меди, лежат в пределах экспериментальных результатов при скорости деформации $0,1-0,5 \text{ нс}^{-1}$. При более низких скоростях деформации $0,01 \text{ нс}^{-1}$ наблюдается превышение данных МД для чистой меди над экспериментальными. В то же время, в этом диапазоне скоростей деформации экспериментальные данные оказываются близкими по величине к результатам МД в случае растяжения системы, содержащей нанопоры.

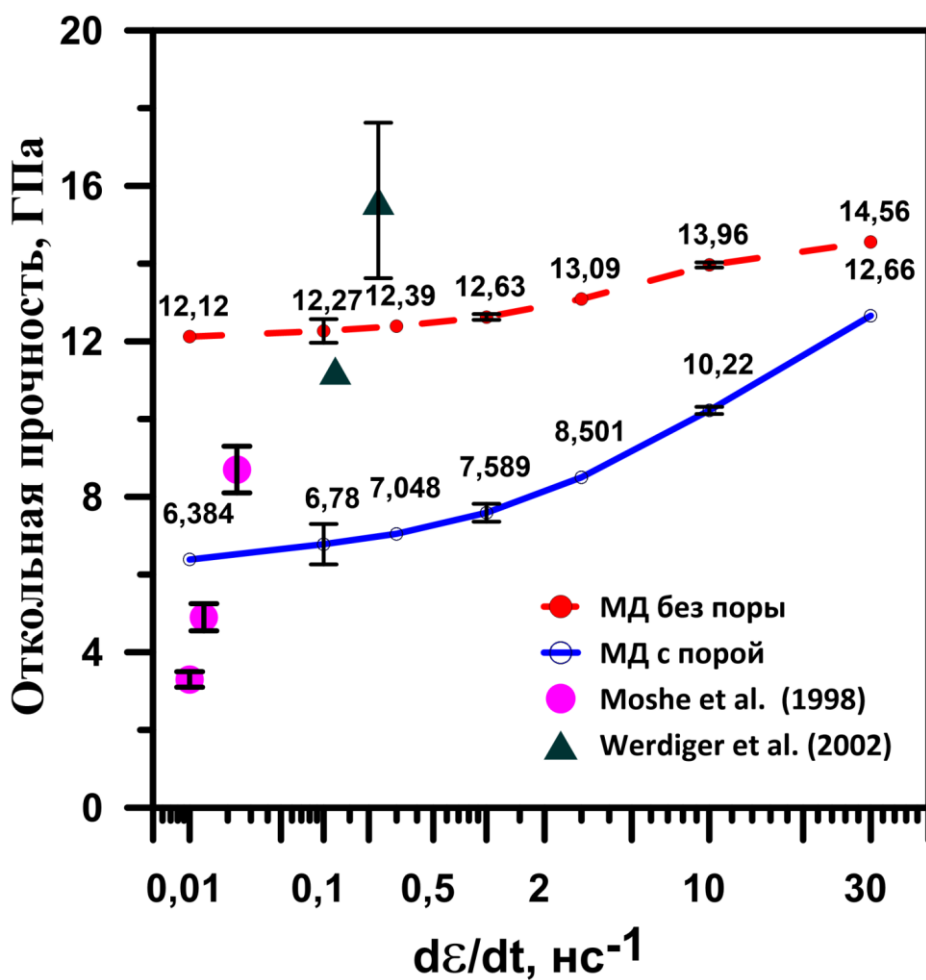


Рис.2.3. Сравнение откольной прочности меди, полученной с помощью моделирования МД, с экспериментальными результатами [18,19] в зависимости от скорости деформации.

В работе [121], на примере свинца и олова, а также в [122], на примере алюминия показано, что откольная прочность однородного материала медленно снижается со снижением скорости деформации и значительно превышает экспериментальные данные для скоростей деформации менее и около $0,01 \text{ нс}^{-1}$. Это объясняется тем, что зарождение пор в однородном материале происходит только при высоком значении растягивающих напряжений, значительно превышающем экспериментально достигаемые значения при таких скоростях деформации. Резкое снижение откольной прочности в эксперименте в диапазоне скоростей деформации менее $0,01 \text{ нс}^{-1}$ объясняется в работе [121] наличием в материале наноразмерных

неоднородностей, концентрация которых недостаточна для релаксации напряжений при сверхвысоких скоростях деформации, но достаточна при умеренных и низких скоростях деформации. Таким образом, с уменьшением скорости деформации ниже $0,01 \text{ нс}^{-1}$ для реальных материалов происходит переход от гомогенного зарождения пор к их гетерогенному образованию на существующих неоднородностях. Такой переход выявлен при анализе экспериментальных данных для ряда материалов, таких как медь, алюминий, олово и др. Поэтому экспериментальные данные [18,19] по откольной прочности меди при скоростях деформации более $0,1 \text{ нс}^{-1}$ близки к МД расчетам для однородного материала, а при более низкой скорости деформации, они близки к МД расчетам для материала с нанопорами.

Механизм роста и сжатия поры

Рассмотрим растяжение и сжатие меди с порами при скорости деформации 1 нс^{-1} и температуре 300 К (рис. 2.4). На начальной стадии до 58 пс (инженерная деформация 0.058) происходит только упругая деформация (рис. 2.4 (а)). На момент времени 58 пс в материале появляются первые дислокационные сегменты. Пора сохраняет свою форму (рис. 2.4 (а), 58 пс) и почти не увеличивается в объеме (рис. 2.5 (б)). В момент времени около 60 пс с поверхности поры начинают испускаться дислокационные полупетли, давление в системе начинает замедлять рост (рис. 2.5 (а)) и упругая деформация всей системы начинает трансформироваться в пластическое течение. В последующие периоды времени дислокации начинают испускаться с поверхности поры все более интенсивно (рис. 2.4 (а), 70 с.). Испускаемые дислокации начинают заполнять материал, начинается быстрый рост пор, что хорошо видно на рис. 2.4, 80–100 пс и рис. 2.5 (б). Процесс становится необратимым, давление в системе начинает расти, и дальнейшими процессами являются развитие сквозных трещин вследствие слияния пор через периодические границы и, как следствие, разрушения материала. В случае сжатия системы с порами упругая стадия длится до 32 пс (рис. 2.4 (б)). За это время радиус пор изменяется не существенно. При

достижении критического напряжения на поверхности поры образуется дислокационная петля (рис. 2.4 (б), 33 пс), которая активирует коллапс поры. Испускаемые дислокации образуют кластер вблизи места расположения пор после ее коллапса (рис. 2.4 (б), 90 пс).

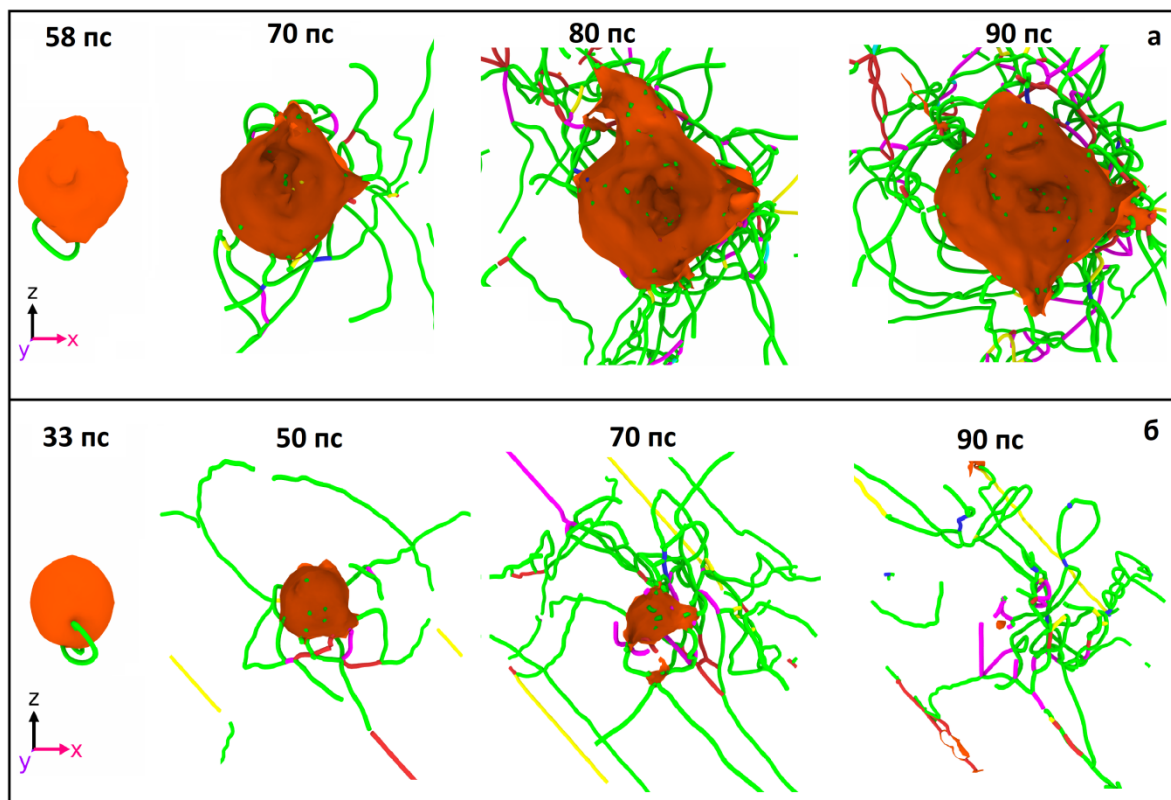


Рис. 2.4. Визуализация процессов вокруг поры в меди во время растяжения (а) и сжатия (б) системы. Поверхность пор выделена оранжевым, а линии частичных дислокаций Шокли окрашены в зеленый. Для моментов 58 и 33 пс показана вся поверхность поры, а в остальных случаях пора рассечена пополам. Температура системы 300 К, скорость деформации 1 нс^{-1} .

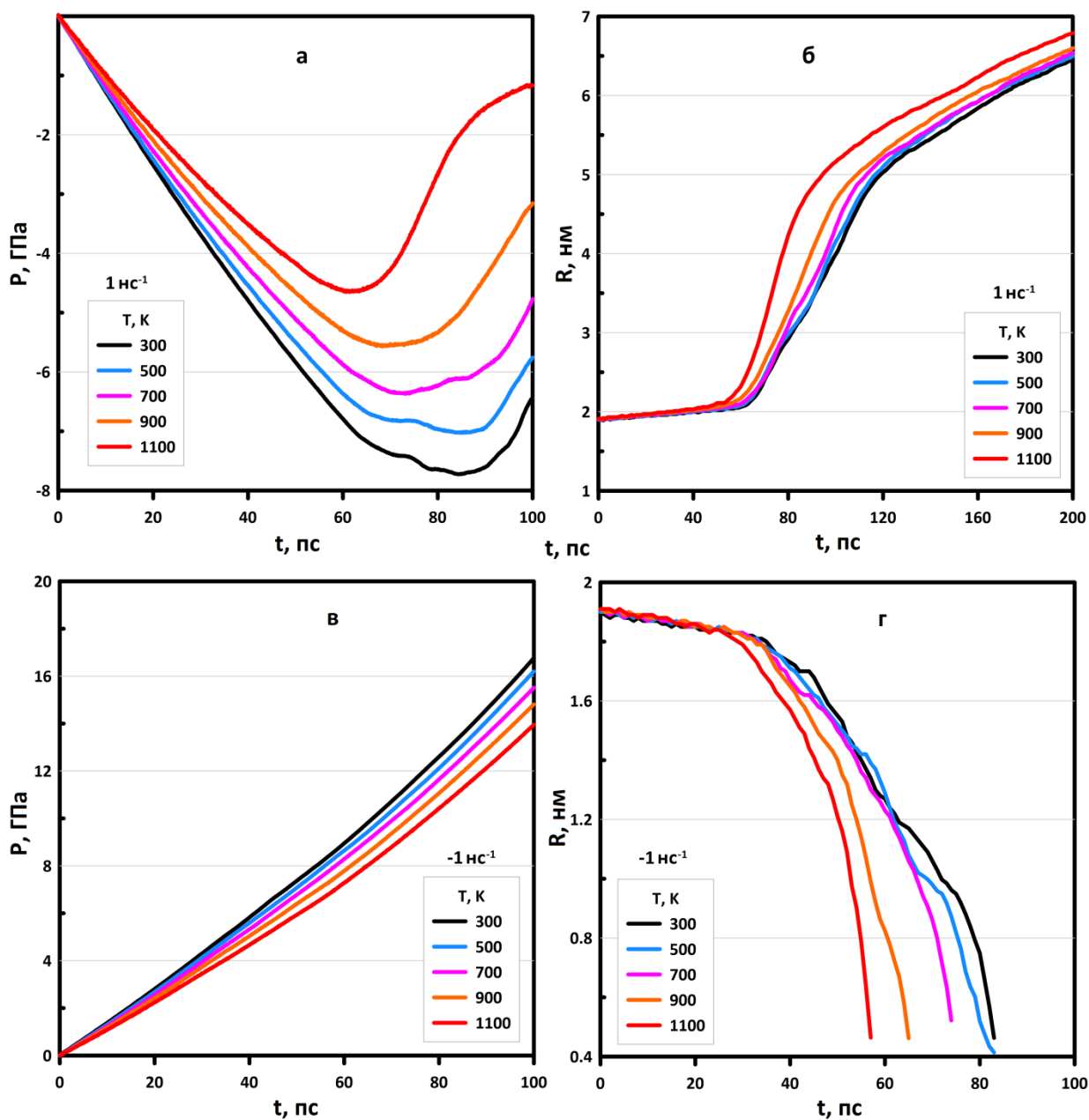


Рис. 2.5. Временные зависимости давления (а, в) и радиуса поры (б, г) для скорости деформации 1 ns^{-1} при различных температурах: МД моделирование для одноосного растяжения (а, б) и сжатия (в, г) нанопористой меди.

Влияние ориентации нагрузки и статистический разброс результатов

На рис. 2.6 представлены результаты исследования ориентационной зависимости (рис. 2.6 (а,б)), и влияния статистического разброса, задаваемого различным начальным распределением атомов по скоростям (рис. 2.6 (в,г)).

Из рис. 2.6 (а) видно, что динамика роста пор и релаксации напряжений одинакова для всех направлений нагружения с некоторыми небольшими вариациями. Разница в откольной прочности при растяжении пористой меди по различным кристаллографическим направлениям не превышает 0,5 ГПа, что составляет около 7%. Для случая сжатия (рис. 2.6 (б)) различие еще менее заметно.

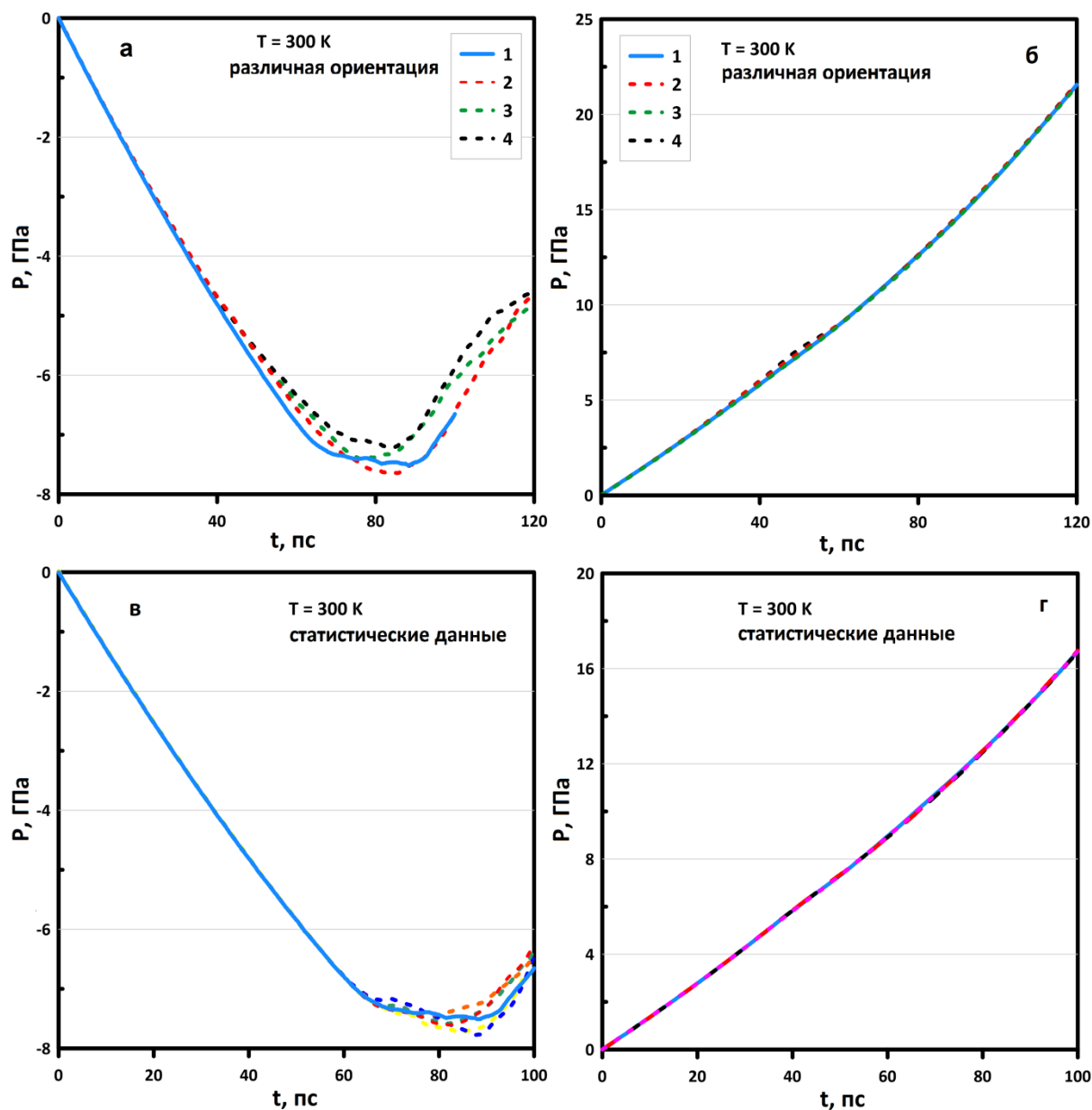


Рис. 2.6. Влияние кристаллографической ориентации нагрузки (а, б) и статистического разброса данных для различных траекторий МД (в, г): зависимости давлений от времени при растяжении (а, в) и сжатии (б, г) меди. Деформация производится вдоль оси x ; скорость деформации 1 нс^{-1} ,

температура 300 К. На (а, б) координатные оси x , y и z совпадают со следующими кристаллографическими направлениями: 1 - $[100][010][001]$, 2 - $[11\bar{2}][\bar{1}10][111]$, 3 - $[110][\bar{1}10][001]$, 4 - $[\bar{1}10][111][11\bar{2}]$. на (в, г), стандартные ориентации $[100][010][001]$.

Кривые давления для различных траекторий растяжения МД, рис. 2.6 (в), показывают идентичное поведение до начала пластической стадии и отчетливое отклонение на стадии пластической деформации. Это типичное поведение для задач зарождения пластичности и разрушения. Начальная упругая деформация образца практически не зависит от тепловых колебаний атомов при одной и той же температуре. После возникновения дефектов (дислокаций или пор) эволюция системы зависит от дефектной структуры, которая, в свою очередь, зависит от случайных факторов, таких как конкретные тепловые скорости атомов. Разница в прочности на растяжение для различных МД траекторий в одном и том же направлении нагружения, рис. 2.6 (в), почти такая же, как и разница между различными направлениями нагружения, рис. 2.6 (а). В случае сжатия, рис. 2.6 (б, г), нет существенной разницы в эволюции давления между различными траекториями МД.

2.4. МД исследование пористого алюминия.

Механизм компактирования пор

Сначала рассмотрим сжатие твердого монокристалла алюминия без пор в качестве точки отсчета для дальнейшего анализа. Всестороннее сжатие приводит к монотонному нелинейному росту давления с деформацией, рис. 2.7 (а), без структурных превращений в рассматриваемом диапазоне деформаций: плотность дислокаций остается нулевой, а структура решетки остается ГЦК. В случае одноосной деформации можно увидеть два перегиба на обеих кривых деформации на рис. 2.7 (а). Первый излом при инженерной деформации около 0,13 сопровождается резким увеличением плотности

дислокаций, рис. 2.7 (б), и уменьшением разницы между осевым напряжением и поперечным напряжением, рис. 2.7 (а). Это начало пластической релаксации, которая начинается с зарождения дислокаций. Второй излом при деформации около 0,25, наоборот, приводит к быстрому уменьшению плотности дислокаций, рис. 2.7 (б), оба напряжения временно уменьшаются, но затем увеличиваются при дальнейшем сжатии, рис. 2.7 (а). Анализ атомных конфигураций показывает, что эта точка соответствует структурному переходу в ОЦК фазу. Этот фазовый переход снижает напряжения и устраняет накопленные дефекты решетки. Можно сделать вывод, что одноосная деформация с ненулевой сдвиговой составляющей напряжения способствует фазовому переходу алюминия в ОЦК фазу.

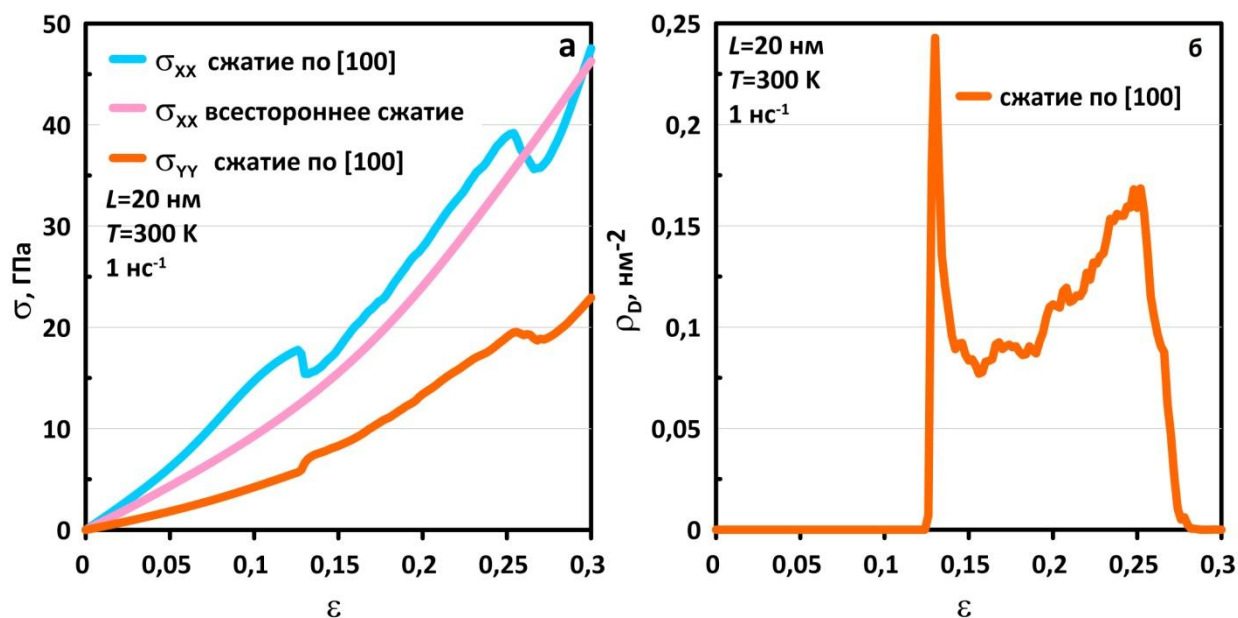


Рис. 2.7. Всестороннее сжатие и одноосное сжатие вдоль кристаллографического направления [100] сплошного алюминия без пор при 300 К и постоянной скорости инженерной деформации 10^9 с $^{-1}$: показаны эволюция напряжений (а) и плотность дислокаций (б). Синяя линия – осевое напряжение, оранжевая линия – поперечное напряжение; осевое напряжение совпадает с давлением в случае всестороннего сжатия. Здесь и далее ось абсцисс соответствует инженерной объемной деформации в случае всестороннего сжатия и инженерной продольной деформации в случае одноосной деформации.

Рассмотрим эволюцию плотности дислокаций на рис. 2.7 (б) между зарождением дислокаций при $\varepsilon = 0,13$ и ОЦК фазовым переходом при $\varepsilon = 0,25$. Начало зарождения дислокаций приводит к резкому увеличению плотности дислокаций, как за счет самого зарождения, так и за счет быстрого размножения зародившихся дислокационных линий. Плотность дислокаций достигает примерно 0,25 дислокационных линий на квадратный нанометр, что соответствует среднему расстоянию между дислокациями 2 нм. Столь высокая плотность дислокаций при высоком уровне напряжения сдвига обеспечивает релаксацию напряжения сдвига со скоростью пластической деформации, превышающей скорость приложенной внешней деформации. Касательное напряжение падает, и аннигиляция дислокаций становится доминирующим процессом, что приводит к быстрому уменьшению плотности дислокаций примерно до 0,1 дислокационной линии на квадратный нанометр (3,3 нм между дислокациями). На этом уровне плотности дислокаций устанавливается баланс между размножением и аннигиляцией. Это равновесное значение плотности дислокаций увеличивается при дальнейшей деформации, что приводит к деформационному упрочнению и увеличению напряжения сдвига. Деформационное упрочнение прерывается переходом в ОЦК фазу.

Рис. 2.8 иллюстрирует схлопывание небольшой сферической поры диаметром 4 нм, как при одноосном, так и при всестороннем сжатии. Вначале происходит чисто упругая деформация без дислокационных участков в материале; пора сохраняет форму и незначительно изменяется в объеме. При определенном уровне деформации ε , равном 0,038 для случая одноосного нагружения и 0,042 для случая всестороннего нагружения, с поверхности пор появляются первые дислокационные полупетли, и упругая деформация всей системы начинает трансформироваться в пластическое течение. Первоначально пластическое течение очень ограничено, потому что зародившаяся полупетля не может распространяться вглубь окружающего

материала. Она остается вблизи поверхности пор, где концентрируются напряжения сдвига. При одноосной деформации среднее касательное напряжение в материале продолжает увеличиваться, что приводит к выходу дислокации из ловушки. Этот выброс дислокаций запускает размножение и распространение дислокаций в объеме при значительной пластической релаксации напряжения сдвига. Таким образом, можно различить зарождение дислокации при $\varepsilon = 0,038$ и ее постепенное испускание при $\varepsilon = 0,05$, приводящее к пластическому течению. Если сравнивать со случаем сплошного материала, то наличие даже небольшой пористости порядка 0,5 % приводит к резкому снижению деформации зародышеобразования (с 0,13 до 0,038) и напряжения зародышеобразования (с 18 ГПа до 5 ГПа). Эмиссия дислокаций и значительное пластическое течение начинаются при 7 ГПа, что тоже намного ниже, чем напряжение зарождения для твердого материала. Поры приводят к более плавному нарастанию и несколько более низкому значению плотности дислокаций, рис. 2.8 (в), по сравнению с одноосной деформацией сплошного алюминия, рис. 2.7 (б). Представленные результаты МД моделирования показаны до схлопывания поры и не достигают стадии деформационного упрочнения и перехода в ОЦК фазу, наблюдаемых на рис. 2.7 при более высоких деформациях.

В случае одноосного нагружения напряжение сдвига, вызванное порами, накладывается на среднее напряжение сдвига, что приводит к более раннему зарождению и эмиссии дислокаций. В случае всестороннего сжатия касательное напряжение возникает только за счет поры и действует локально в окрестности поры. В результате зарождение дислокаций происходит позже, при $\varepsilon = 0,042$, а эмиссия дислокаций практически отсутствует: дислокации остаются локализованными вблизи положения поры, а основной объем свободен от дислокаций, рис. 2.8 (д). Несмотря на сравнимые концентрации линий дислокаций вокруг схлопывающейся поры, сравните рис. 2.8 (а) и рис. 2.8 (д), средняя плотность дислокаций при всестороннем нагружении в

2–3 раза ниже, чем при одноосном нагружении из-за этих больших участков без дислокаций, рис. 2.8 (в).

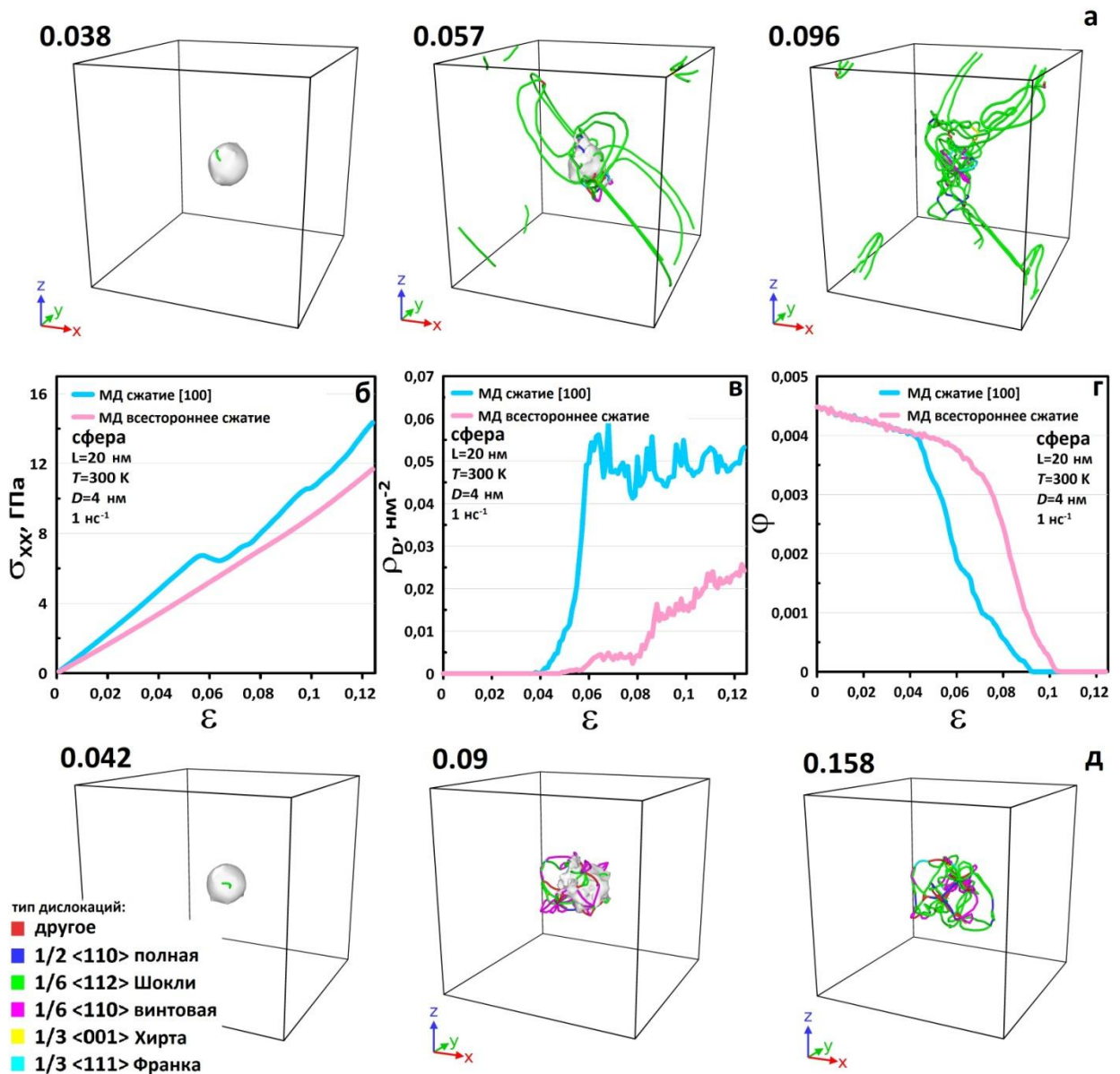


Рис. 2.8. Пластическое схлопывание сферической поры диаметром 4 нм в алюминии при одноосном (а) и всестороннем (д) сжатии при 300 К: (а, д) показаны поверхность поры и дислокационные линии, преобладающие дислокации Шокли окрашены в зеленый цвет; (б, в, г) эволюция продольного напряжения, плотности дислокаций и пористости соответственно.

Результаты МД моделирования для крупной сферической поры представлены на рис. 2.9. Зарождение дислокационных петель происходит аналогично случаю мелкой поры, но происходит при большей деформации:

0,041 при одноосном нагружении и 0,052 при всестороннем нагружении. Такая задержка зарождения дислокаций по сравнению со случаем малой поры свидетельствует о менее интенсивной концентрации напряжений вокруг крупной поры. С другой стороны, область концентрации напряжений значительно шире, и нет существенной задержки между зарождением дислокаций и эмиссией, запускающей пластическое течение вокруг крупной поры. Даже в случае всестороннего сжатия пластическая деформация, необходимая для компактирования крупной поры, настолько велика, что дислокации проникают через весь объем системы, а плотность дислокаций сравнима с таковой для случая одноосного нагружения.

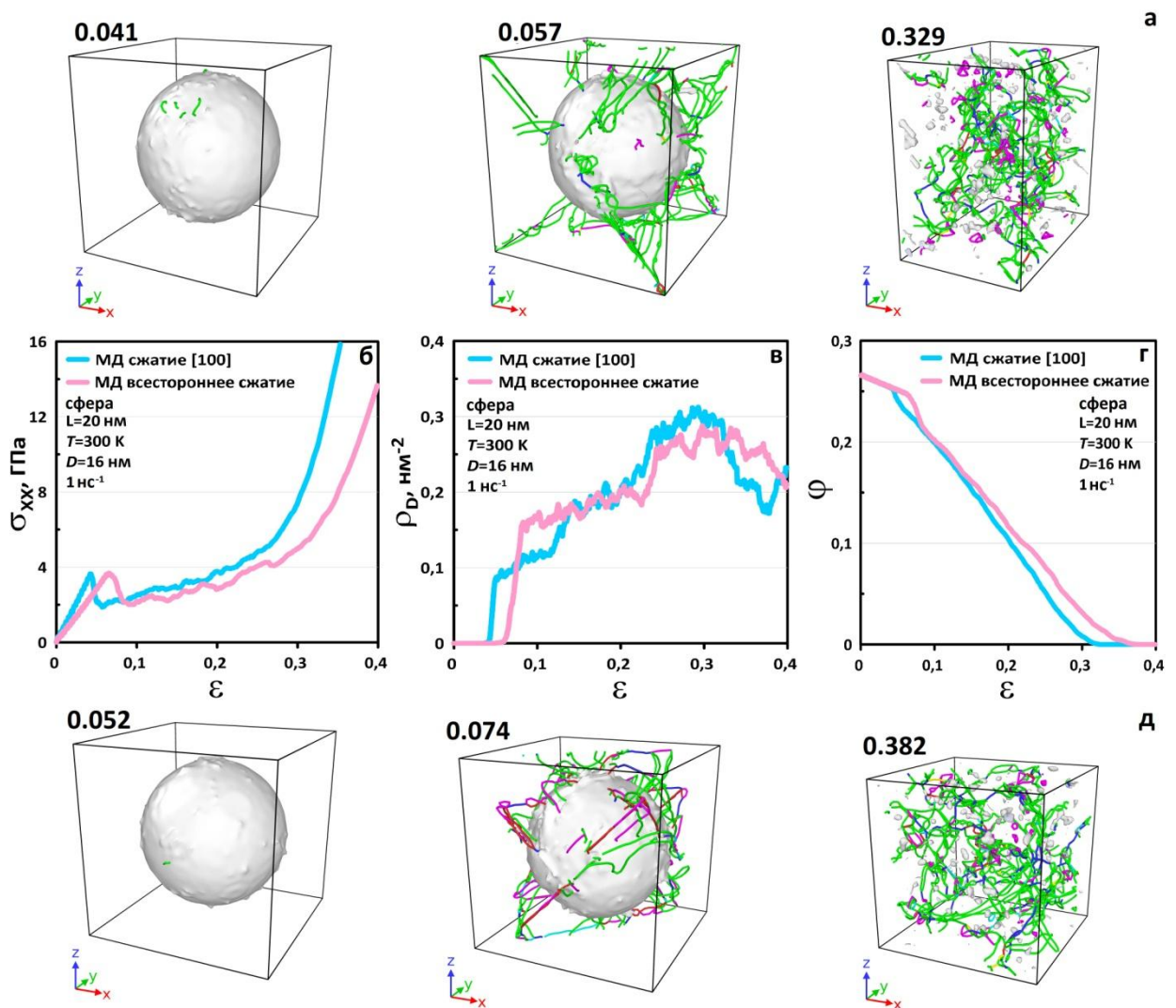


Рис. 2.9. Пластическое схлопывание крупной сферической поры диаметром 16 нм в алюминии при одноосном (а) и всестороннем (д) сжатии при 300 К: (а, д) показаны поверхность поры и дислокационные линии, преобладающие

частичные дислокации Шокли окрашены в зеленый цвет; (б, в, г) эволюция продольного напряжения, плотности дислокаций и пористости соответственно.

Кривые деформации для систем с большой пористостью типичны для пористых пен с микро- или миллиметровыми порами (см. главу 1): плато соответствует сжатию пор, и накопленная деформация на этой стадии связана с исходной пористостью, а последующая растущая часть кривых сжатия означает уплотнение материала и переход в компактное твердое состояние без пор. Отличительной чертой является начальная упругая стадия, которая заканчивается выбросом дислокаций, проявляющимся в виде всплеска напряжения.

В случае кубических или цилиндрических пор общие закономерности зарождения и развития пластического течения такие же, как и в случае сферических пор. Основное отличие заключается в величине деформации нуклеации дислокаций, которая зависит от формы поры. На рис. 2.10 и 2.11 показаны начальные моменты возникновения зарождающихся дислокационных петель и соответствующие деформации для МД систем с кубическими и цилиндрическими порами соответственно. Зарождение дислокаций на кубических порах с плоскими гранями, рис. 2.10, замедлено по сравнению со случаем сферических пор, рис. 2.8 и 2.9. В то же время зарождение на цилиндрических порах происходит при тех же или даже меньших приложенных деформациях, чем на сферических порах; сравните рис. 2.11 с рис. 2.8 и 2.9. Дислокации легче образуются на округлых поверхностях цилиндрических пор, а не на плоских поверхностях этих пор, (рис. 2.11). Все это свидетельствует о более низком пороге зарождения дислокаций на округлых поверхностях по сравнению с плоскими поверхностями. Различие в пороге зарождения можно частично объяснить более эффективной концентрацией напряжений вблизи закругленных поверхностей, в то время как плоские поверхности концентрируют

напряжения только в узких зонах их слияния, таких как ребра куба. О преимущественном образовании дислокаций вблизи закругленной поверхности ранее в литературе не сообщалось.

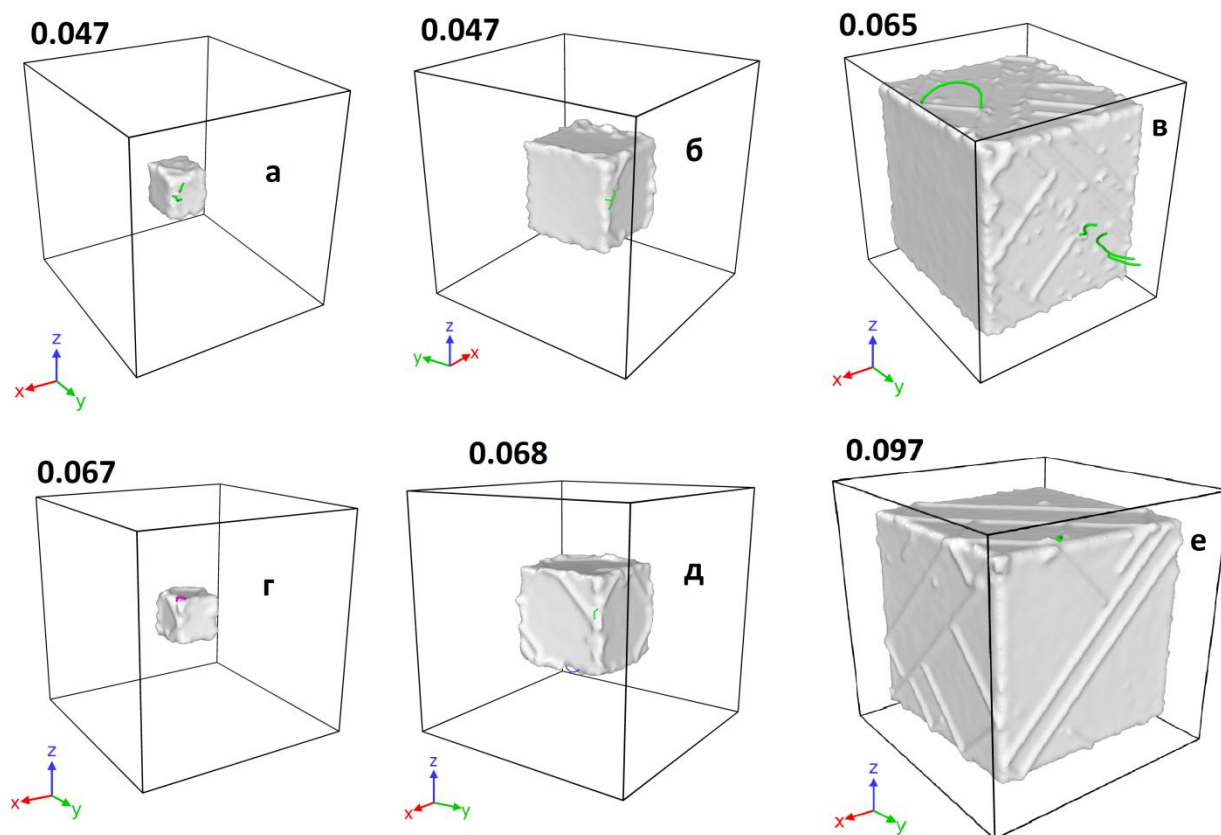


Рис. 2.10. Моменты зарождения дислокаций в системах с кубическими порами в алюминии: (а, г) мелкие 4 нм поры, (б, д) средние 8 нм поры и (в, е) крупные 16 нм поры при одноосном сжатии вдоль направления $[100]$ (а, б, в) и всестороннем сжатии (г, д, е) при 300 К; моменты нуклеации дислокаций (значения инженерной деформации) указаны на рисунках. Показаны поверхность пор, найденная алгоритмом «Construct surface mesh», и линии дислокаций, найденные алгоритмом «DXA».

Данные МД, представленные на рис. 2.8–2.11 показывают сложную зависимость порогов зарождения и эмиссии дислокаций от формы и размера пор, а также от условий нагружения. Малые и средние поры приводят к почти одинаковому порогу зарождения, в то время как поры большого размера задерживают зарождение, см. рис. 2.10. Дополнительное среднее

касательное напряжение за счет одноосного нагружения материала с цилиндрическими порами либо снижает порог зарождения, либо повышает его по сравнению с всесторонним сжатием, (рис. 2.11). Эти факты свидетельствуют о сложных закономерностях зарождения дислокаций.

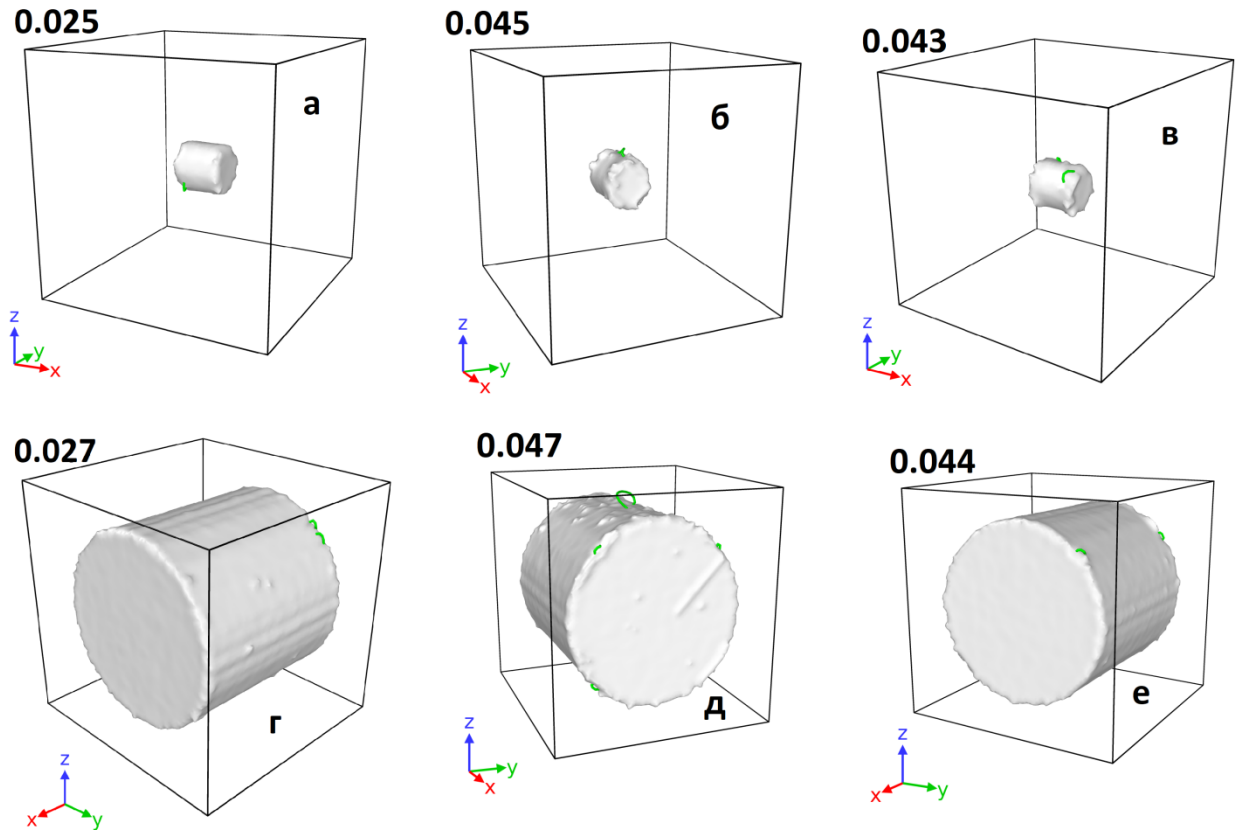


Рис. 2.11. Моменты зарождения дислокаций в системах с цилиндрическими порами в алюминии: (а, б, в) мелкие 4-нм поры и (г, д, е) крупные 16-нм поры (а, г) одноосное сжатие вдоль направления $[100]$ (вдоль оси цилиндра), (б, д) одноосное сжатие вдоль направления $[010]$ (перпендикулярно оси цилиндра) и (в, е) всестороннее сжатие при 300 К; моменты нуклеации дислокаций (значения инженерной деформации) указаны на рисунках. Показаны поверхность пор, найденная алгоритмом «Construct surface mesh», и линии дислокаций, найденные алгоритмом «DXA».

На рис. 2.12 и 2.13 сравнивается эволюция средних характеристик системы, осевого напряжения, плотности дислокаций и пористости для МД систем со сферическими, кубическими и цилиндрическими порами. В случае

небольших пор и одноосного нагружения эмиссия дислокаций начинается при близких значениях деформации, около 0,05, для всех рассмотренных форм пор, рис. 2.12 (а-в), несмотря на обсуждавшееся выше различие в деформациях зарождения. Напомним, что зарождение происходит раньше, чем испускание. Эмиссия проявляется в быстром увеличении плотности дислокаций, уменьшении пористости и релаксации напряжений. Близкие значения деформации, приводящей к эмиссии дислокаций, можно объяснить следующим образом. Эмиссия начинается тогда, когда касательные напряжения становятся достаточно высокими для распространения дислокаций в основном объеме материала, а форма пор незначительно влияет на напряжения вдали от поверхности пор. В случае всестороннего сжатия, рис. 2.12 (г-е), дислокации остаются локализованными вблизи поры, но пластическое схлопывание пор также начинается при близких деформациях, около 0,08 для разных форм пор.

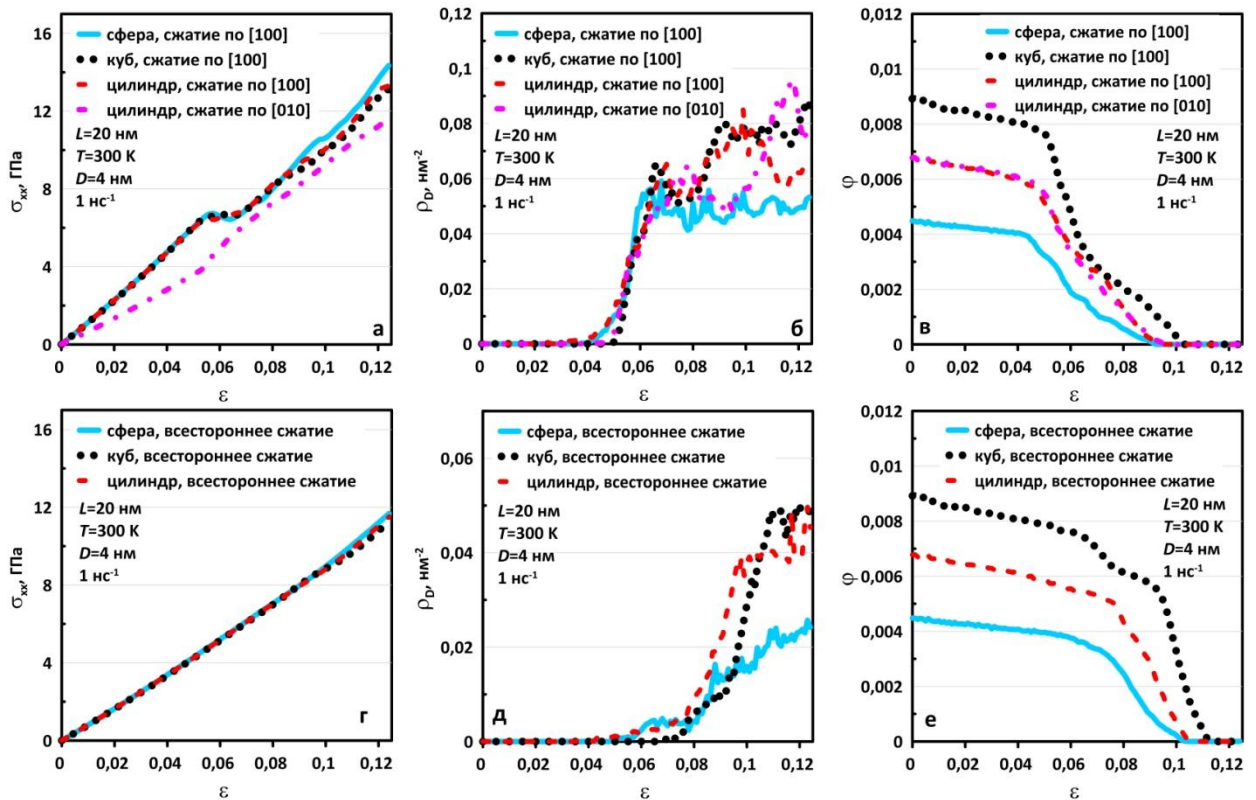


Рис. 2.12. Сравнение продольного напряжения (а, г), плотности дислокаций (б, д) и пористости (в, е) для случаев сферических, кубических и

цилиндрических пор диаметра 4 нм в алюминии для (а, б, в) одноосного сжатия в направлении $[100]$ и (г, д, е) всестороннего сжатия при 300 К.

Эволюция напряжений в системе с малыми порами практически не зависит от ее формы, за исключением случая бокового (вдоль направления $[010]$) сжатия цилиндрических пор, рис. 2.12 (а). Это связано с тем, что схлопывание мелких пор действует только как триггер пластического течения, которое релаксирует среднюю сдвиговую составляющую напряжения в случае одноосного нагружения, рис. 2.12 (а), и не изменяет давление в случае всестороннего нагружения.

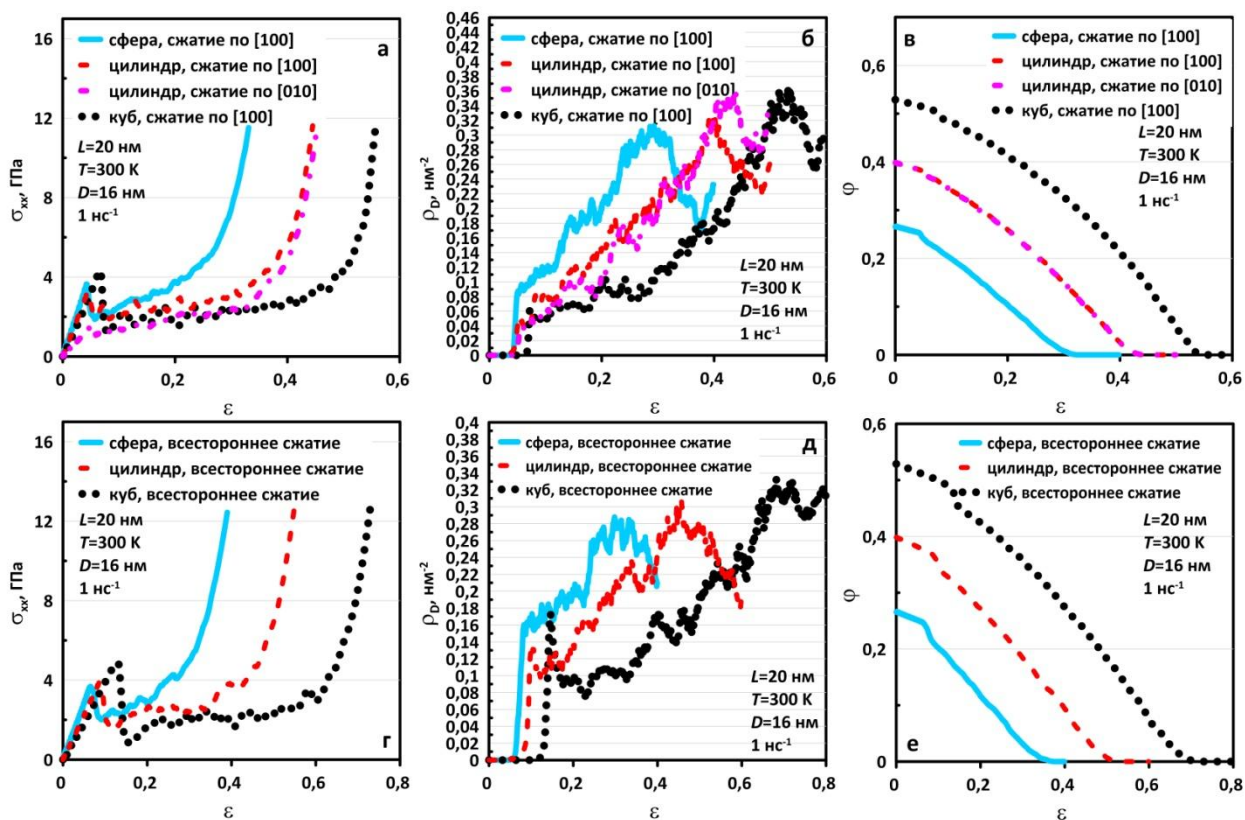


Рис. 2.13. Сравнение продольного напряжения (а, г), плотности дислокаций (б, д) и пористости (в, е) для случаев сферических, кубических и цилиндрических пор диаметра 16 нм в алюминии для (а, б, в) одноосного сжатия в направлении $[100]$ и (г, д, е) всестороннего сжатия при 300 К.

В случае крупных пор, занимающих значительную часть материала, процесс схлопывания пор является основной сущностью эволюции системы

вплоть до инженерных деформаций порядка 0,3–0,5 в зависимости от исходной пористости. Начальный линейный рост напряжения прерывается зарождением дислокаций и почти одновременным испусканием. Момент перехода к пластическому течению зависит от формы пор. После этого момента напряжения падают и в дальнейшем остаются близкими к определенному уровню вплоть до схлопывания поры. После коллапса пор происходит быстрое увеличение напряжения в уплотненном твердом материале. Стадия эволюции системы после начала пластического течения в наибольшей степени зависит от начальной пористости. Полученная плотность дислокаций после схлопывания пор близка для всех форм пор.

Влияние размера системы и скорости деформации на динамику сжатия пористого алюминия исследовано с помощью МД моделирования, и полученные результаты обобщены на рис. 2.14. Пропорциональное увеличение размера пор и размера системы при постоянной начальной пористости снижает порог испускания дислокаций и высоту пиков напряжений, рис. 2.14 (а). Последующая эволюция близка для разных систем и лежит в пределах статистического разброса, присущего кинетическому процессу пластичности на микроуровне. Уменьшение скорости деформации на порядок снижает порог испускания дислокаций примерно на 10–15%, но последующая эволюция лежит в пределах статистического разброса, как показано на рис 2.14 (б,в). Общий результат исследования, представленного на рис. 2.14, состоит в том, что увеличение размера системы при сохранении пористости или уменьшение скорости деформации приводит к более раннему переходу к пластическому течению и меньшему значению пиковых напряжений, тогда как последующая эволюция системы остается неизменной. Это означает, что полученные кривые напряжение-деформация достаточно обычны даже для более крупных пор и более медленного нагружения, несмотря на рассмотренную сверхвысокую скорость деформации (10^9 с^{-1}) и очень маленькую систему размером 20 нм. Благодаря малому масштабу рассматриваемой микроструктуры (наноразмер пор и

расстояние между порами) механическое поведение системы не слишком далеко от квазистатического предела, несмотря на формально высокие скорости деформации. Поэтому есть смысл в аппроксимации этих кривых искусственной нейронной сетью (ИНС). Кроме того, в качестве характеристики, описывающей начальную микроструктуру рассматриваемого материала во входном векторе ИНС, целесообразнее использовать начальную пористость, а не сам размер пор.

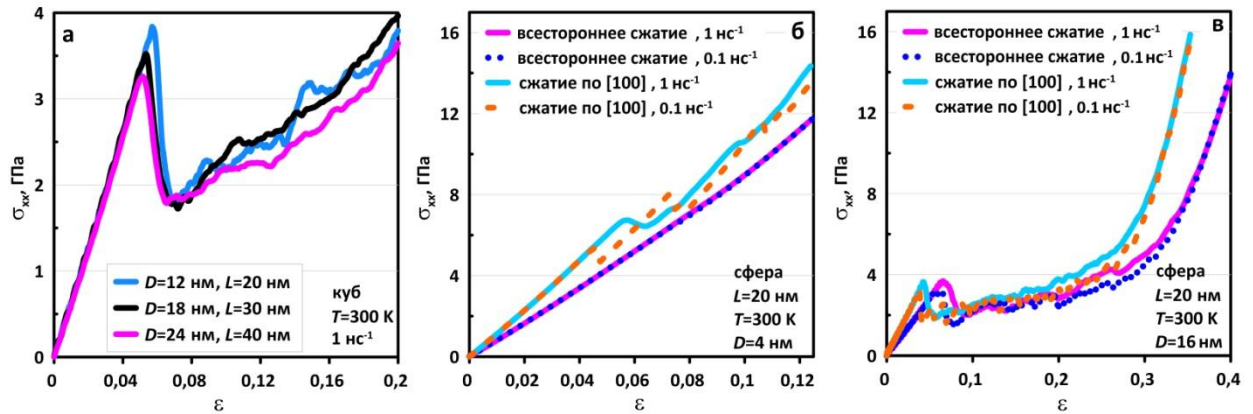


Рис. 2.14. Сравнение кривых растяжения пористого алюминия для: (а) трех различных размеров системы при постоянной начальной пористости; (б, в) при разных скоростях деформации.

2.5. МД исследование пористого магния

Случай маленькой поры диаметром 4 нм

На рис. 2.15 представлено поведение магния с порой диаметром 4 нм при сжатии по кристаллографическому направлению $[\bar{1}2\bar{1}0]$, ось x . Упругая стадия деформации длится до $\varepsilon = 0,042$, после этого момента начинается рост дислокационных петель с поверхности поры. Переход из упругой в пластическую стадию сопровождается эмиссией дислокаций с поверхности поры. С деформации $\varepsilon = 0,053$ дислокации начинают отделяться с поверхности поры и уходить в сплошную часть материала, после 2–3 испускания, уже образованные дислокационные сегменты соединяются друг с другом. При этом размеры самих дислокационных сегментов соизмеримы с

размером поры, из которой они испустились. При сжатии в этом направлении дислокационные сегменты сохраняют свою форму и размер на всей пластической стадии деформации вплоть до схлопывания поры. Окончательное схлопывание поры при деформации $\varepsilon = 0,108$ (рис. 2.15 (а)) приводит к появлению поверхностных дефектов, которые начинают испускать дислокации. С этого момента наблюдается резкий рост плотности дислокаций (рис. 2.15 (г)) и пластическая деформация распространяется по всему объему материала.

В случае одноосного сжатия направлению $[\bar{1}2\bar{1}0]$ (ось x) достигаются самые высокие напряжения (рис. 2.15 (в)) так как деформация приходится на ребро жесткости ГПУ решетки. Можно заметить, что рост и испускание дислокаций происходит по плоскости xu в виде полупетли, а по z в виде линии (рис. 2.15 (а)). В момент начала пластического течения с поверхности поры появляются дислокации, которые начинают распространяться в окружающий материал. Изначально они растут с поверхности поры в плоскости xu , но после испускания движутся по направлению x т.е. по направлению сжатия. Можно заметить что испускается сразу 4 дислокации сверху и снизу поры в направлении $+x$ и $-x$ (рис.2.15 (а), $\varepsilon = 0,053$). После того как дислокации в виде колец отцепляются с поверхности поры они замыкаются дислокационными линиями (рис. 2.15 (а), $\varepsilon = 0,089$). С началом пластического течения испущенные дислокации концентрируют вокруг себя области пониженного давления, эти зоны движутся вместе с дислокационным сегментом (рис.2.15 (б), $\varepsilon = 0,089$).

При сжатии в направлении $[\bar{1}2\bar{1}0]$ движущиеся дислокационные сегменты обеспечивают разгрузку давления вокруг себя и также по тому пути, по которому распространяются, за счет пластического компактирования поры. В итоге образуется область низких давлений в форме цилиндра, проходящая через центр материала и вытянутая вдоль направления сжатия. К моменту, когда пора полностью схлопнулась,

образовавшиеся поверхностные дефекты создают области с повышенного давления (рис.2.15 (б), $\varepsilon = 0,108$).

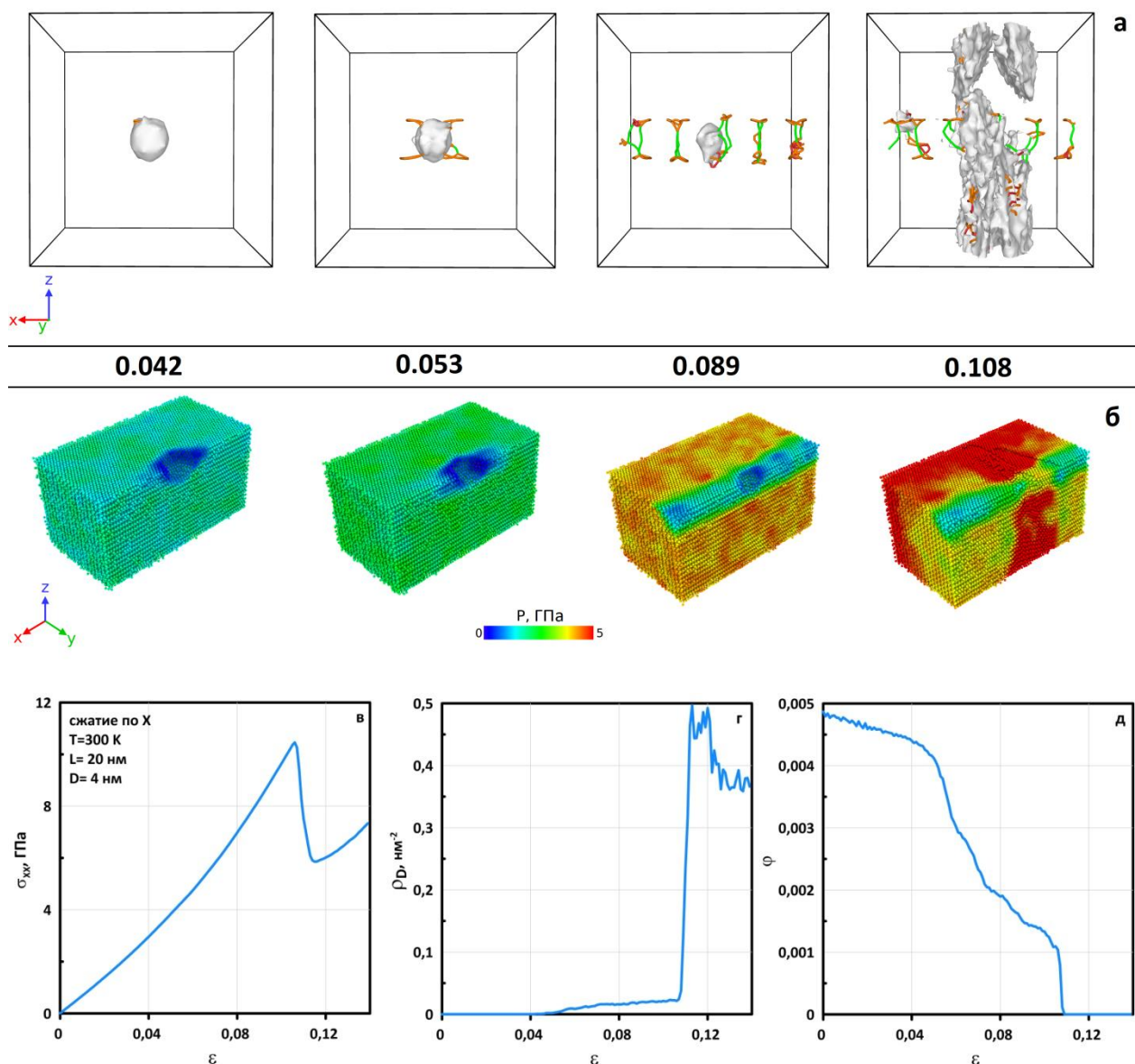


Рис. 2.15. Сжатие магния с порой диаметром 4 нм по кристаллографическому направлению $[\bar{1}2\bar{1}0]$, ось x , температура 300 К, система 20x20x20 нм. Показаны: поверхность поры и дислокации на различных стадиях деформации (а); распределения давления в системе (б); кривые напряжения (в), плотности дислокаций (г) и пористости (д) в системе в зависимости от деформации.

В случае сжатия по $[10\bar{1}0]$, ось y , дислокации растут и распространяются в плоскости xz , т.е. под некоторым углом к направлению

сжатия (рис. 2.16). Характерной особенностью является то, что дислокационный сегмент не отсоединяется с поверхности поры как при сжатии по x , а вытягивается в материал (рис. 2.16 (а), $\varepsilon = 0,053$). Вместе с тем, структура дислокаций остается такой же, как и при сжатии по направлению $[\bar{1}2\bar{1}0]$: два дислокационных кольца (оранжевые линии) соединенные дислокационной линией (зеленые линии). К моменту схлопывания поры ($\varepsilon = 0.1$) остается 2 пласта, состоящих из дислокаций. Расстояние между ними примерно равно изначальному размеру поры.

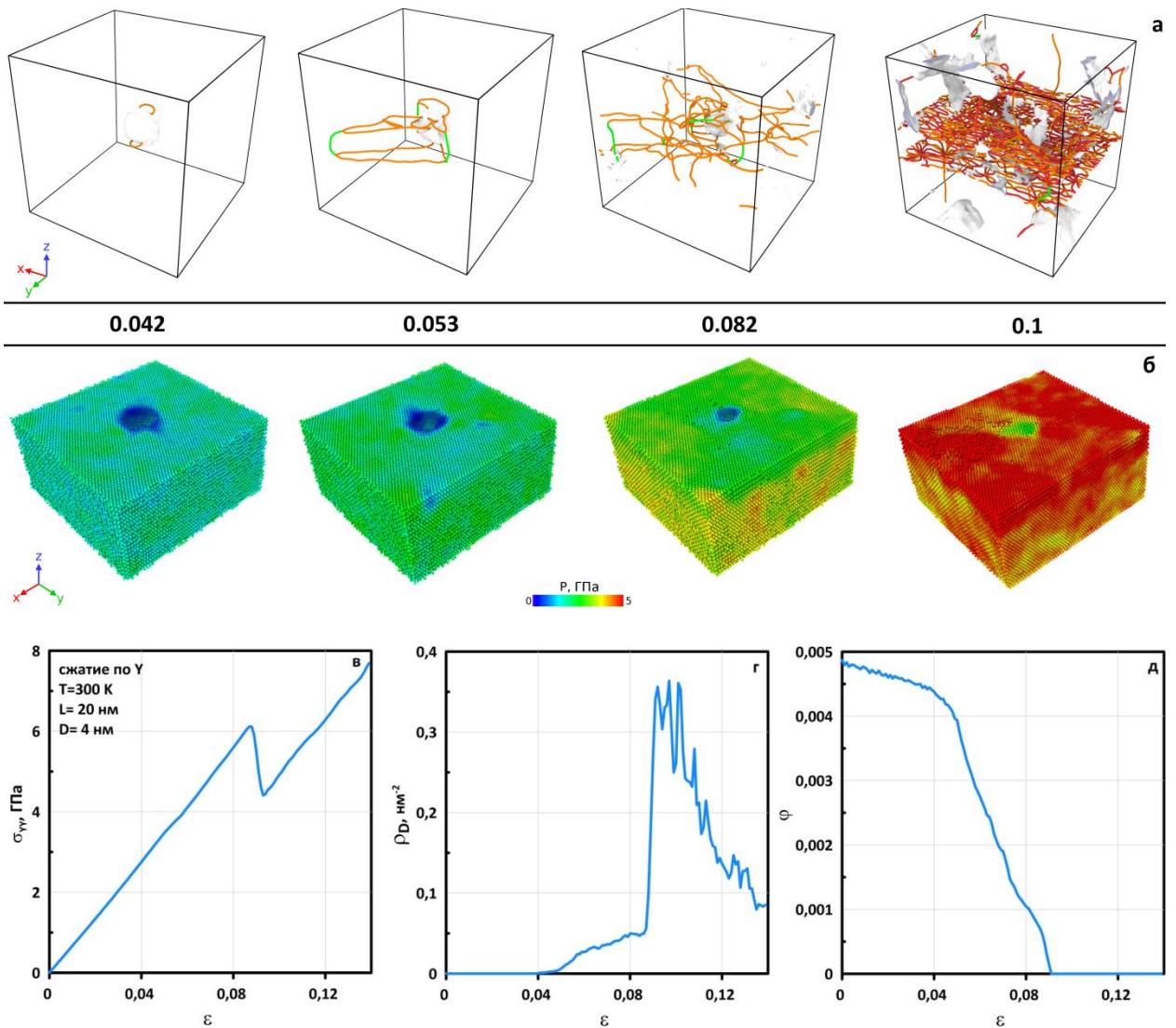


Рис. 2.16. Сжатие магния с порой диаметром 4 нм по кристаллографическому направлению $[\bar{1}0\bar{1}0]$, ось y , температура 300 К, система $20 \times 20 \times 20$. Показаны поверхность поры и дислокации на различных стадиях деформации (а);

распределения давления в системе (б); кривые напряжения (в), плотности дислокаций (г) и пористости (д) в системе в зависимости от деформации.

В случае сжатия по направлению $[0001]$, ось z , (рис. 2,17) первые дислокационные полупетли появляются около $\varepsilon = 0,054$ (рис. 2,17 (а)). В случаях сжатия по x и y была задействована базисная плоскость скольжения ГПУ металла $[0001]$, соответственно дислокации распространялись в направлении xu . Для случая z , дислокации распространяются в материале по пирамидальной системе скольжения $[\bar{1}102]$ или по диагонали (рис.2.17 (а), $\varepsilon = 0,058-0,062$).

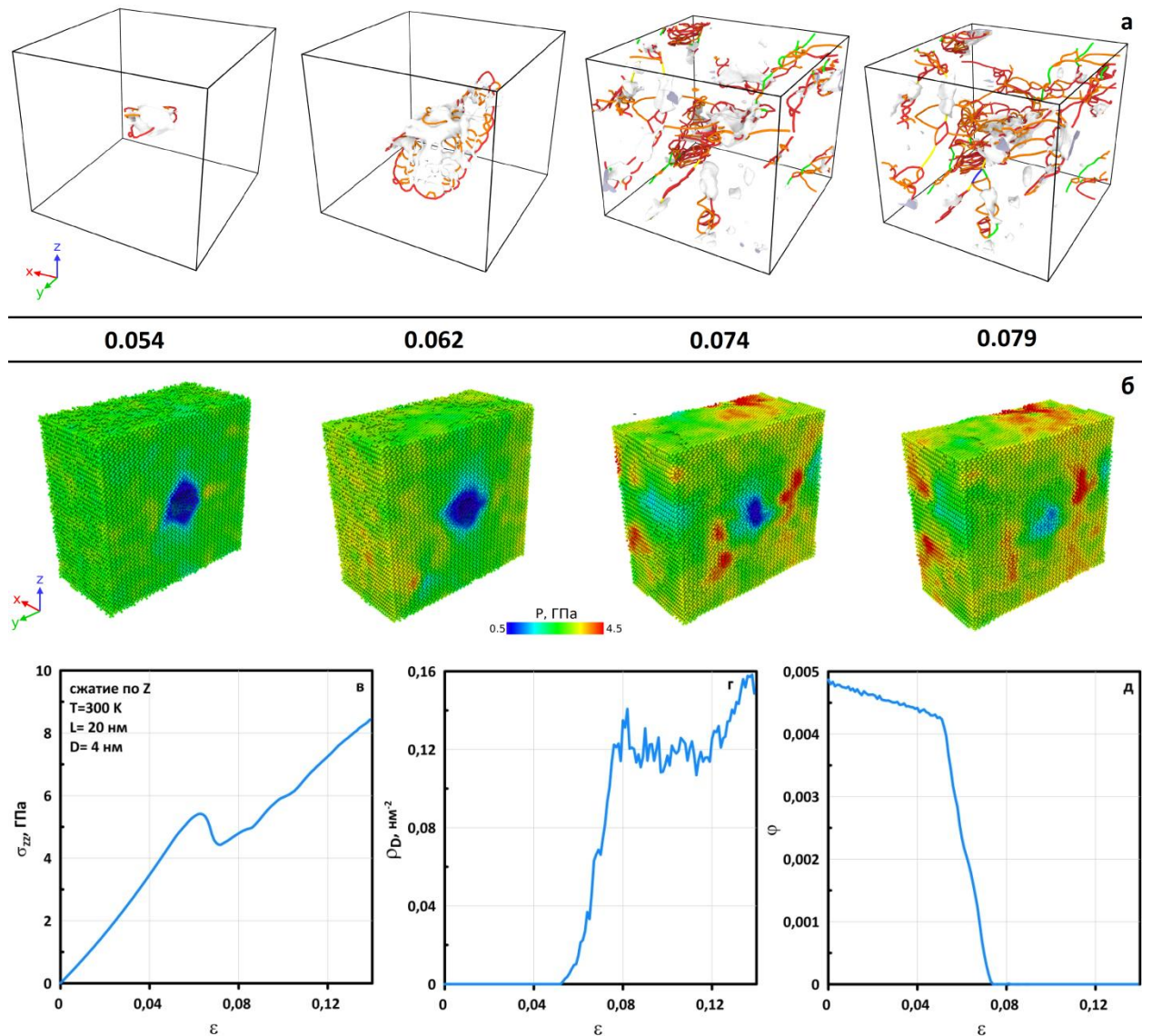


Рис. 2.17. Сжатие магния с порой диаметром 4 нм по кристаллографическому направлению $[0001]$, ось z , температура 300 К, система $20 \times 20 \times 20$. Показаны

поверхность поры и дислокации на различных стадиях деформации (а); распределения давления в системе (б); кривые напряжения (в), плотности дислокаций (г) и пористости (д) в системе в зависимости от деформации.

Для всестороннего сжатия (рис. 2.18) ситуация отличается от всех случаев одноосного нагружения. Дислокационные петли начинают образовываться позже. Если в предыдущих случаях дислокационные петли после образования начинали испускаться с поверхности поры и распространяться в материал, то в случае всестороннего сжатия не происходит отделения дислокационных петель с поверхности поры. До момента схлопывания поры они локализируются рядом с ней.

Для случая всестороннего сжатия наблюдается монотонный почти линейный рост напряжений с деформацией (рис. 2.18 (а)). Плотность дислокаций ниже всех остальных случаев сжатия (рис. 2.18 (г)). *Пластическое схлопывание* поры начинается позже всех случаев одноосного сжатия (рис. 2.18 (д)). Дислокации отсоединяются от поверхности поры только перед моментом схлопывания. Как и при одноосной деформации, давление ниже вблизи поверхности поры, поскольку материал здесь может сжимать пору вместо того, чтобы сжиматься самому. После коллапса поры давление постепенно выравнивается.

Из рис. 2.15-2.18 очевидно, что динамика развития дислокационной пластичности и эволюция поры в материале с ГПУ решеткой существенно зависит от направления нагружения. В случае компактирования маленькой поры в ГПУ металле для каждого из случаев одноосного сжатия можно выделить яркие характерные черты поведения материала. Во всех случаях сжатия маленькой поры нет стадии плато, вместо этого происходит резкое снижение напряжений в период от начала пластического течения до момента схлопывания поры, затем напряжение снова увеличивается в уплотненном материале.

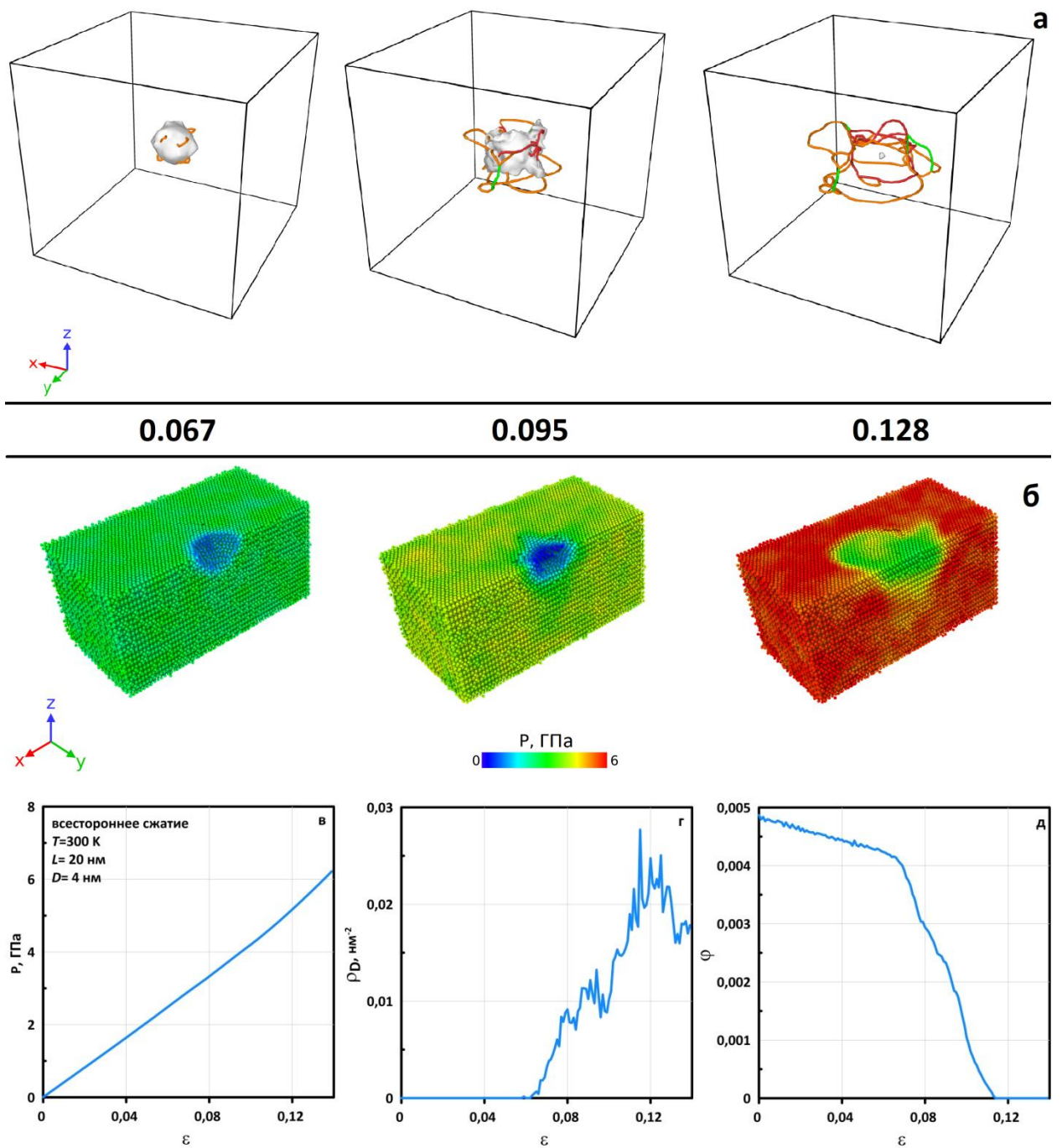


Рис. 2.18. Всестороннее сжатие магния с порой диаметром 4 нм, температура 300 К, система 20x20x20. Показаны поверхность поры и дислокации на различных стадиях деформации (а); распределения давления в системе (б); кривые давления (в), плотности дислокаций (г) и пористости (д) в системе в зависимости от деформации.

Случай крупной поры диаметром 16 нм

В случае одноосного сжатия по направлению $[\bar{1}2\bar{1}0]$, ось x , крупной поры диаметром 16 нм эмиссия дислокаций начинается при деформации $\varepsilon = 0.044$ (рис. 2.19 (а)). Как и в случае маленькой поры (2.15 (б)), области пониженного давления распределяются вдоль направления сжатия. В случае большой поры хорошо видно, что пора не сохраняет свою сферичность (рис. 2.19 (б), 0.248): материал вдавливается вдоль направления сжатия внутрь поры.

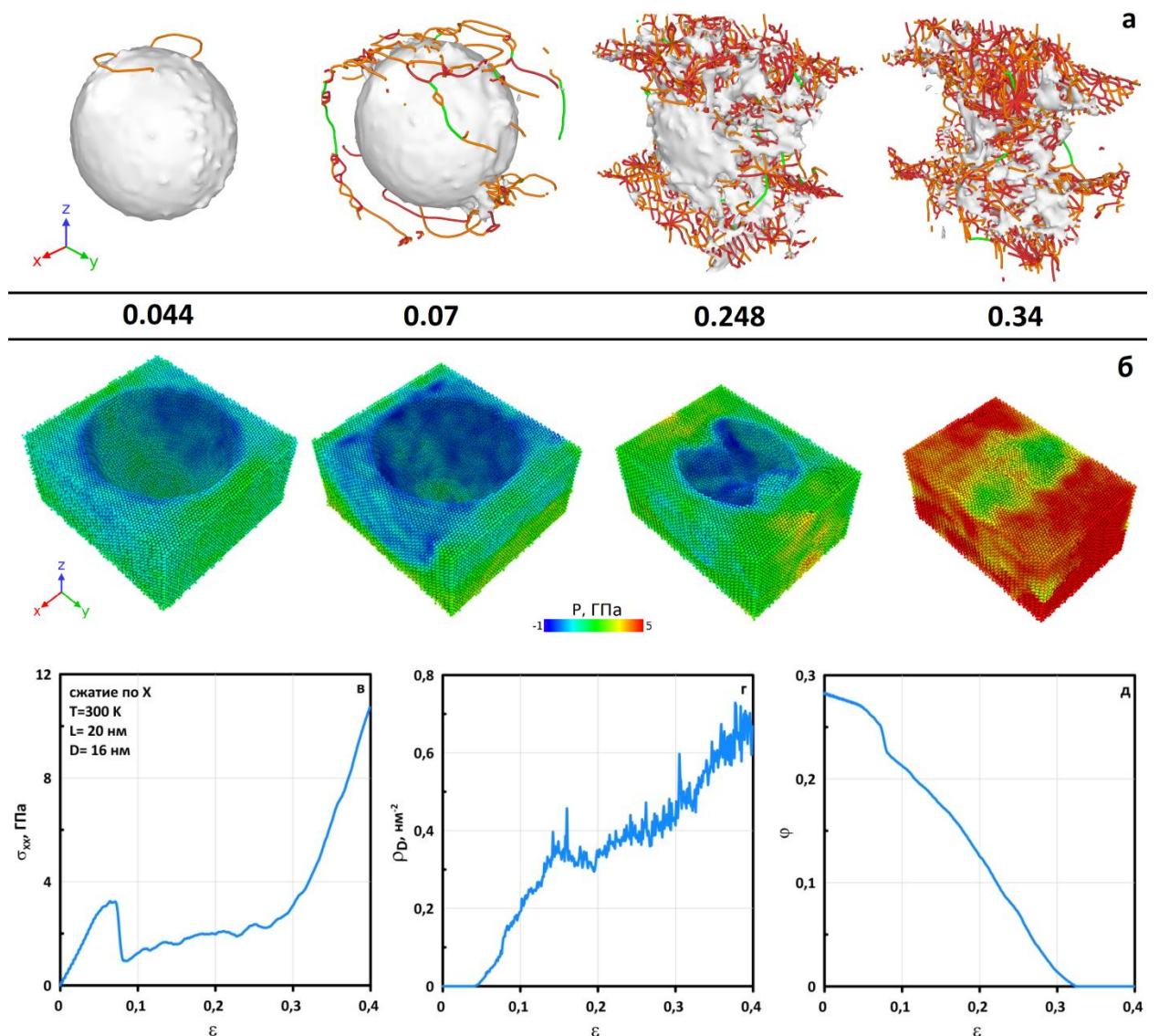
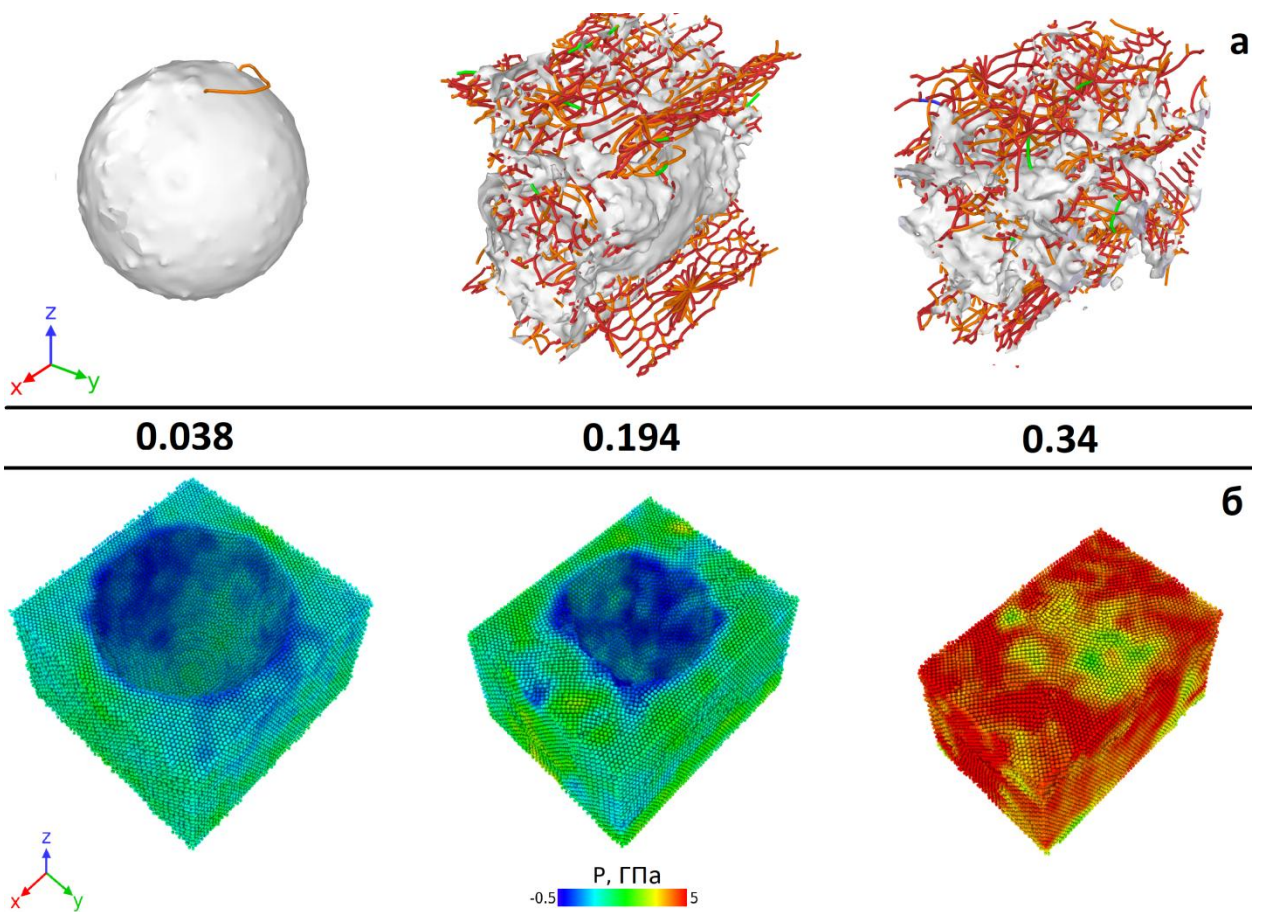


Рис. 2.19. Сжатие магния с крупной порой диаметром 16 нм по кристаллографическому направлению $[\bar{1}2\bar{1}0]$, ось x . Показаны поверхность поры и дислокации на различных стадиях деформации (а); распределения

давления в системе (б); кривые напряжения (в), плотности дислокаций (г) и пористости (д) в системе в зависимости от деформации.

При сжатии по направлению $[10\bar{1}0]$, ось y (рис. 2.20), форма поры также не сохраняется. Компактирование поры в направлении сжатия сопровождается ее ростом и соединением соседних пор в перпендикулярных направлениях. В отличие от предыдущего случая, наблюдается более резкий рост плотности дислокаций. При этом нет ярко выраженного уменьшения напряжения (рис. 2.20 (в)) на стадии перехода к пластическому течению. Пористость уменьшается более гладко.



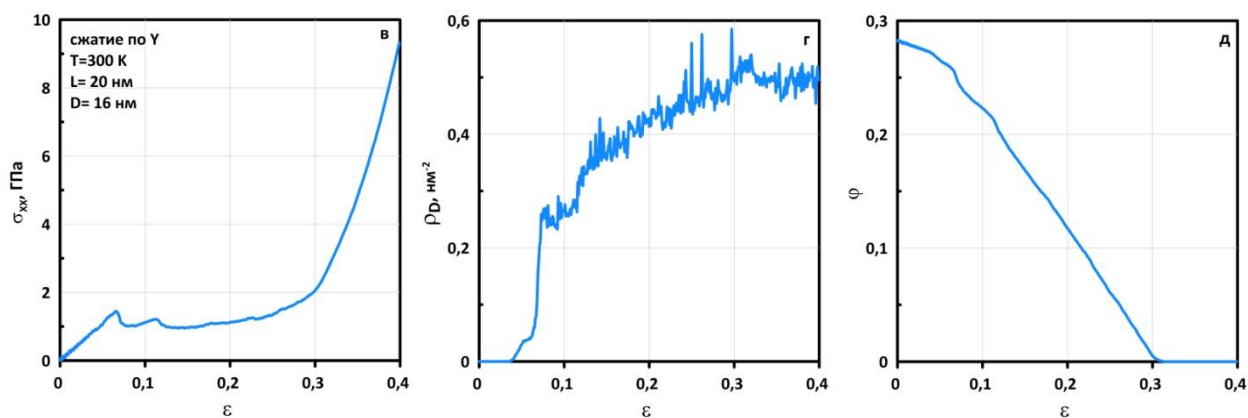
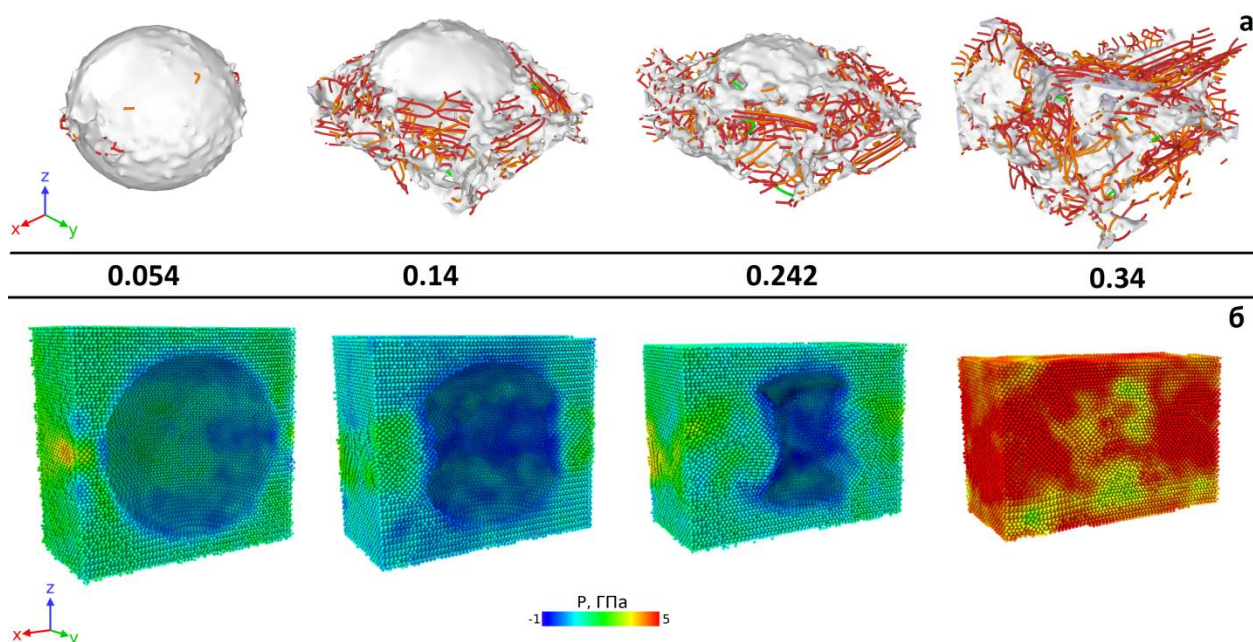


Рис. 2.20. Сжатие магния с крупной порой диаметром 16 нм по кристаллографическому направлению $[10\bar{1}0]$, ось y . Показаны поверхность поры и дислокации на различных стадиях деформации (а); распределения давления в системе (б); кривые напряжения (в), плотности дислокаций (г) и пористости (д) в системе в зависимости от деформации.

В случае одноосного сжатия по направлению $[0001]$, ось z (рис. 2.21), испущенные дислокации опоясывают пору перпендикулярно направлению сжатия (рис. 2.21 а).



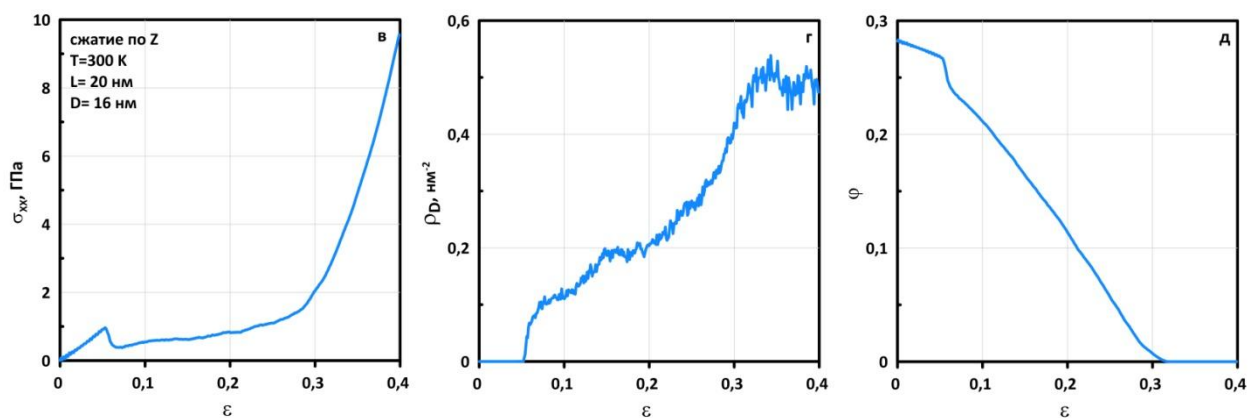


Рис. 2.21. Сжатие магния с крупной порой диаметром 16 нм кристаллографическому направлению $[0001]$, ось z . Показаны поверхность поры и дислокации на различных стадиях деформации (а); распределения давления в системе (б); кривые напряжения (в), плотности дислокаций (г) и пористости (д) в системе в зависимости от деформации.

Случай всестороннего сжатия магния с порой диаметром 16 нм показан на рис. 2.22. Можно отметить что при всестороннем сжатии пора сохраняет свою сферичность на всех стадиях деформации (рис. 2.22 (а,б)). На графике зависимости напряжения от деформации (рис. 2.22 (в)) наблюдаются 2 перегиба после окончания упругой стадии деформирования.

Для крупных пор, с одной стороны, сохраняются те же особенности движения дислокаций при сжатии по разным кристаллографическим направлениям ГПУ решетки магния, что и для малых пор. С другой стороны, наличие большой пористости приводит к некоторому усреднению поведения материала, так что механическая реакция пористого магния при сжатии по разным кристаллографическим направлениям различается меньше, чем это имеет место для малых пор (малой пористости).

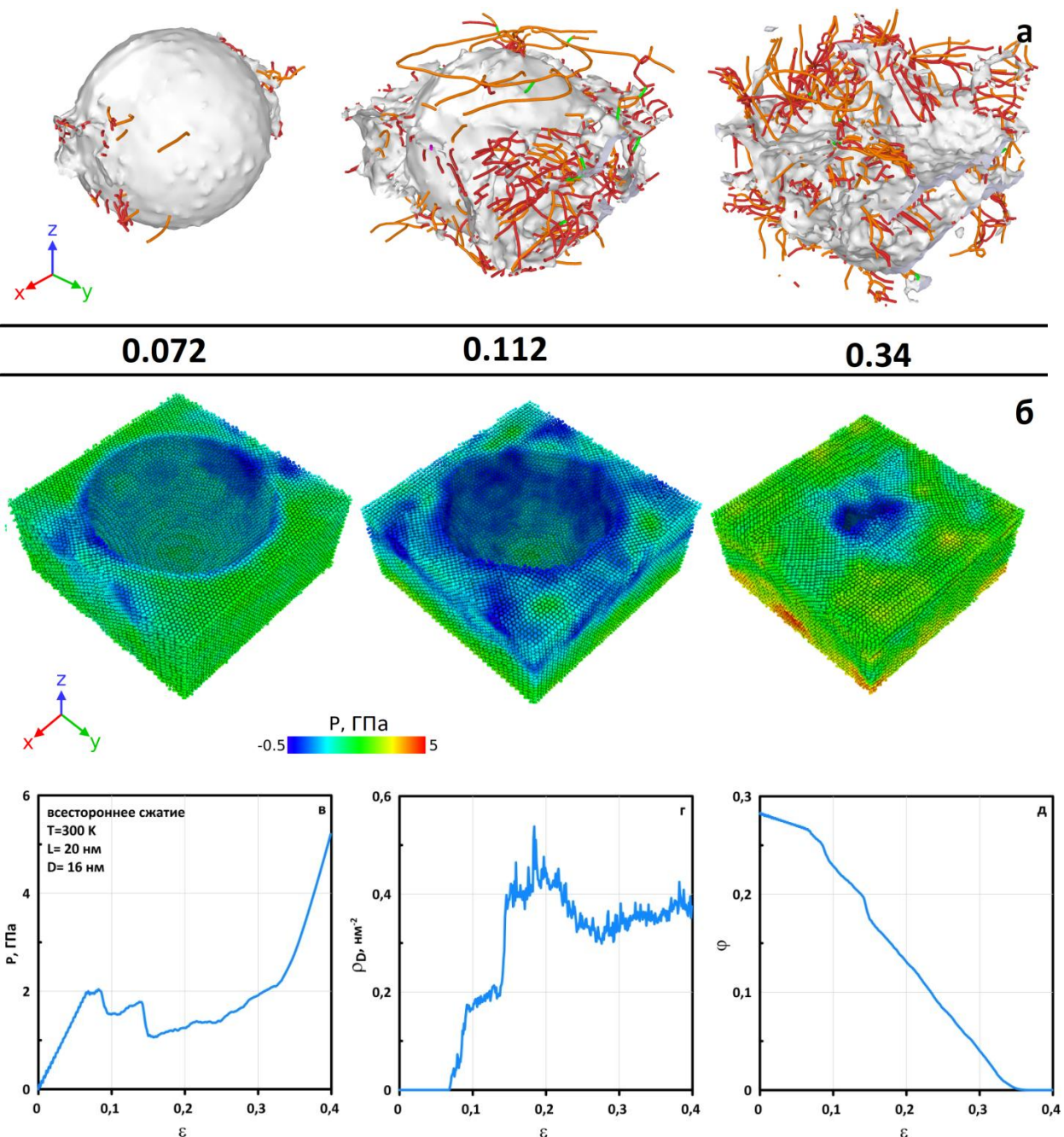


Рис. 2.22. Всестороннее сжатие магния с крупной порой диаметром 16 нм. Показаны поверхность поры и дислокации на различных стадиях деформации (а); распределения давления в системе (б); кривые давления (в), плотности дислокаций (г) и пористости (д) в системе в зависимости от деформации.

Выводы по второй главе

Проведен численный эксперимент на основе МД моделирования по деформированию репрезентативных объемов пористых алюминия, магния и меди. Начало пластического роста или схлопывания пор вызвано эмиссией дислокаций с поверхности пор и соответствующим добавлением или удалением некоторого объема из них. С атомистической точки зрения перегруппировка атомов за счет движения дислокационных петель с поверхности внутрь материала приводит к изменению поверхности пор. Дальнейшее развитие пластической деформации приводит к образованию зоны сильного пластического течения вокруг поры; эта зона характеризуется большим количеством дислокаций. Смещение атомов происходит по всей поверхности поры, но атомы, лежащие рядом с первыми испущенными дислокациями, получают максимальное смещение. С континуальной точки зрения, пластическая деформация ослабляет напряжения сдвига, возникающие в окрестности пор при упругой деформации, и способствует дальнейшему изменению объема пор под действием растягивающего или сжимающего напряжения.

Наличие пористости в материале приводит к резкому снижению пороговой деформации, при которой происходит нуклеация дислокаций, и напряжения, необходимого для возникновения дислокационных полупетель. При наличии пустот в металле происходит плавное нарастание плотности дислокаций и достигается более низкая плотность насыщения по сравнению со случаем сплошного металла.

Зарождение дислокационных петель происходит аналогично, как для крупных, так и мелких пор; отличается величина деформации, при которой начинают испускаться дислокации. В случае разных форм пор в материале нет существенной разницы между закономерностями появления дислокаций и развития пластического течения при деформации. Округлые поверхности цилиндра или ребра куба являются большими концентраторами напряжений, и испускание дислокаций чаще происходит в этих зонах. В случае

одноосного сжатия пористого магния на поведение системы влияет анизотропия ГПУ решетки.

В случае одновременного увеличения размера пор и расстояния между ними, а также в случае уменьшения скорости деформации происходит более ранний переход к пластическому течению, но сама пластическая стадия деформации проходит практически по тому же сценарию. Поэтому рассмотренные в МД высокие скорости деформации и маленькие размеры систем не являются сильным ограничением для полученных результатов, которые пригодны для разработки определяющих уравнений на основе ИНС или параметризации модели.

Глава 3. Континуальное моделирование и машинное обучение

3.1 Структура искусственной нейронной сети и процедура обучения

Для аппроксимации результатов МД по деформационному поведению нанопористого алюминия используется глубокая искусственная нейронная сеть (ИНС) с прямой связью [123,124], структура которой показана на рис. 3.1. Материал характеризуется начальной пористостью и коэффициентом формы Ψ , который определяется как отношение площади поверхности рассматриваемых пор к площади поверхности сферических пор того же объема. Этот коэффициент формы равен 1 для сферических пор, 1,145 для цилиндрических пор и 1,241 для кубических пор.

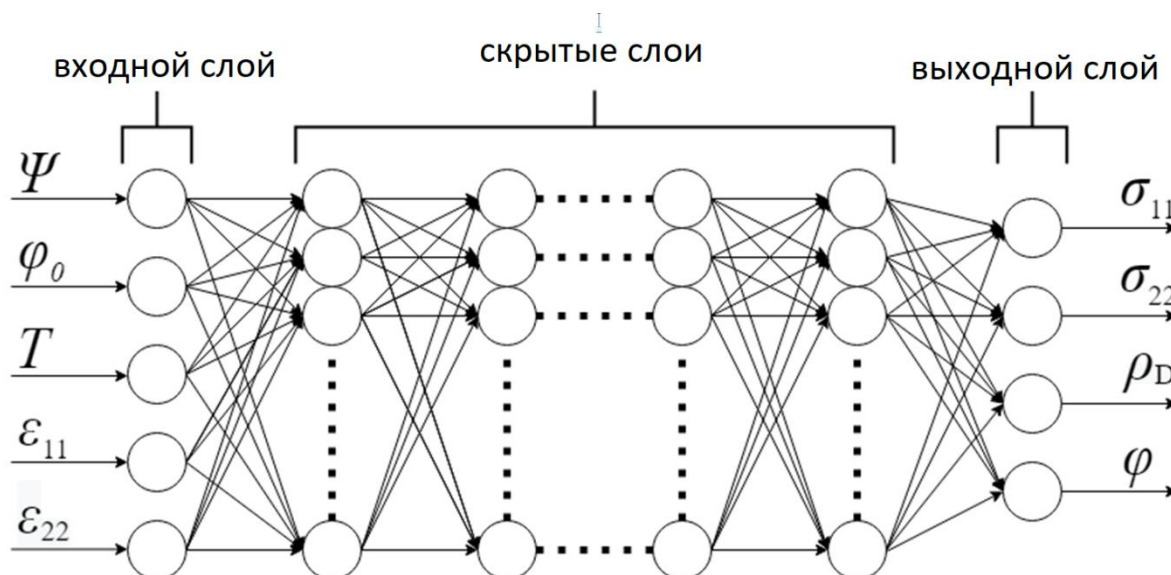


Рис. 3.1. Схема ИНС прямого распространения, описывающая процесс сжатия нанопористого алюминия. Входные данные следующие: Ψ коэффициент формы пор, φ_0 начальная пористость, T температура, ε_{11} продольная деформация и ε_{22} поперечная деформация. ИНС вычисляет выходной вектор, где σ_{11} продольное напряжение, σ_{22} поперечное напряжение, ρ_D плотность дислокаций и φ текущая пористость.

На вход ИНС подаются исходная пористость, коэффициент формы, температура, продольная деформация и поперечная деформация, образующие вектор входных значений. Выходной вектор, состоящий из

продольных и поперечных напряжений, а также плотности дислокаций и пористости, образует выходной слой. Кроме входного и выходного слоев имеется $(L-2) = 4$ скрытых слоя, состоящих из заданного числа нейронов, что в нашей конфигурации равно $N_l = N = 30$ для каждого скрытого слоя $l \in [2, L-1]$. Количество нейронов в выходном слое заведомо равно $N_L = 4$.

В случае магния структура нейронной сети была идентична случаю алюминия кроме выходного слоя, где количество нейронов выходного слоя было равно $N_L = 5$ (рис. 3.2). Добавленный нейрон позволяет получить напряжения σ_{33} . Помимо отличий в выходном слое на вход нейронной сети подавалась соответствующая деформация ε_{33} вместо коэффициента формы поры Ψ . Использование глубокой нейронной сети с несколькими скрытыми слоями оправдано тем, что она дает более высокую точность [123] по сравнению с сетями с большим количеством нейронов в одном слое.

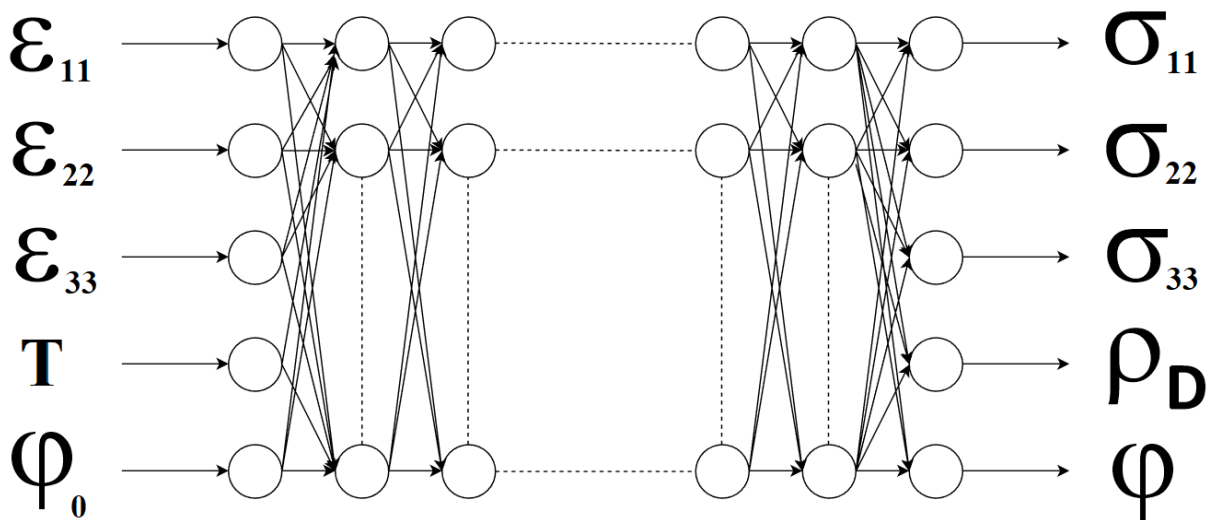


Рис. 3.2. Схема ИНС прямого распространения, описывающая процесс сжатия нанопористого магния. Входные данные следующие: $\varepsilon_{11}, \varepsilon_{22}, \varepsilon_{33}$ - деформации вдоль трех кристаллографических направлений, T температура, φ_0 начальная пористость. ИНС вычисляет выходной вектор, где σ_{11}, σ_{22} и σ_{33} напряжения вдоль кристаллографических направлений, ρ_D плотность дислокаций и φ текущая пористость.

Каждый нейрон в сети (кроме нейронов входного слоя) вычисляет сигнал, который передается на нейроны следующего слоя. Обозначим эти сигналы как X_j^l , где l — номер слоя, а j — количество нейронов в этом слое. Эти сигналы рассчитываются по следующей формуле:

$$X_j^l = f_l \left(\sum_{k=1}^{N_{l-1}} A_{jk}^l X_k^{l-1} + b_j^l \right), \quad l = 2, \dots, L, \quad j = 1, \dots, N_l, \quad (3.1)$$

где $f_l(S_j^l)$ — передаточная функция этого слоя с аргументом, равным

$$S_j^l = \sum_{k=1}^{N_{l-1}} A_{jk}^l X_k^{l-1} + b_j^l, \quad (3.2)$$

где A_{jk}^l веса и b_j^l смещения; эти параметры подбираются во время обучения ИНС.

ReLU (parametric rectified linear unit) передаточная функция [125] используется в случае вычисления сигналов нейронов в скрытых слоях:

$$f_l(S) = \begin{cases} S & \text{if } S \geq 0 \\ u \cdot S & \text{if } S < 0 \end{cases}, \quad l = 2, \dots, L-1, \quad (3.3)$$

где $u = 0.7$ является параметром. Сигналы нейронов выходного слоя рассчитываются с помощью сигмоидной передаточной функции, так как она дает более гладкую кривую:

$$f_L(S) = \frac{1}{1 + \exp(-S)}. \quad (3.4)$$

Для обучения ИНС используется алгоритм обратного распространения ошибки. Сначала вычисляются различия $(X_j^L - Y_j)$ между выходом ИНС X_j^L при текущих весах и смещениях и целевых значениях Y_j из набора обучающих данных, а затем оцениваются требуемые поправки аргументов выходных нейронов следующим образом:

$$\delta_j^L = (X_j^L - Y_j) \cdot f_L'(S_j^L), \quad (3.5)$$

где $f'_L(S_j^L)$ является производной сигмоидной передаточной функции выходного слоя. Следующее соотношение используется для расчета соответствующих поправок для скрытых слоев:

$$\delta_j^l = \sum_{k=1}^{N_{l+1}} (A_{kj}^{l+1} \delta_k^{l+1}) \cdot f'_l(S_j^l) \quad (3.6)$$

где l изменяется от $(L-1)$ до 2. Вычисляя значения ошибок, которые дают нейроны, можно изменить веса и смещения:

$$\Delta A_{jk}^l = \beta \delta_j^l X_k^{l-1}, \quad \Delta b_j^l = \beta \delta_j^l, \quad (3.7)$$

где β скорость обучения. Таким образом, происходит обучение ИНС, изменяются коэффициенты A_{jk}^l и b_j^l , а ошибка минимизируется с каждой итерацией обучения. Обучение включает многократные итерации коррекции коэффициентов со случайным выбором целевых данных из набора обучающих данных. В данной работе обучающие данные генерируются с помощью МД моделирования.

3.2 Результаты аппроксимации деформационного поведения нанопористого алюминия и магния искусственной нейронной сетью

ИНС, описывающая уплотнение пористого алюминия, была обучена с использованием данных МД для линейного размера пор $D = 4, 8$ и 16 нм. Случай промежуточного размера пор $D = 12$ нм использовался для проверки обученной ИНС, так как эти данные не входили в процесс обучения. На рис. 3.3, 3.4 и 3.5 показаны сравнения прогноза ИНС и результатов МД моделирования на валидационных данных с размером пор 12 нм. Из рисунков видно, что ИНС вполне неплохо предсказывает поведение нанопористого алюминия при его деформации. Хотя все кривые пористости из ИНС имеют некоторые выбросы с заниженной пористостью на начальном этапе деформации, общие тренды всех рассматриваемых величин и их численные значения прогнозируются с помощью ИНС вполне адекватно. Следует также отметить, что плотность дислокаций является довольно

стохастической характеристикой, которая существенно флуктуирует в зависимости от конкретной атомной конфигурации, и ИНС или другой подход не могут точно воспроизвести ее эволюцию.

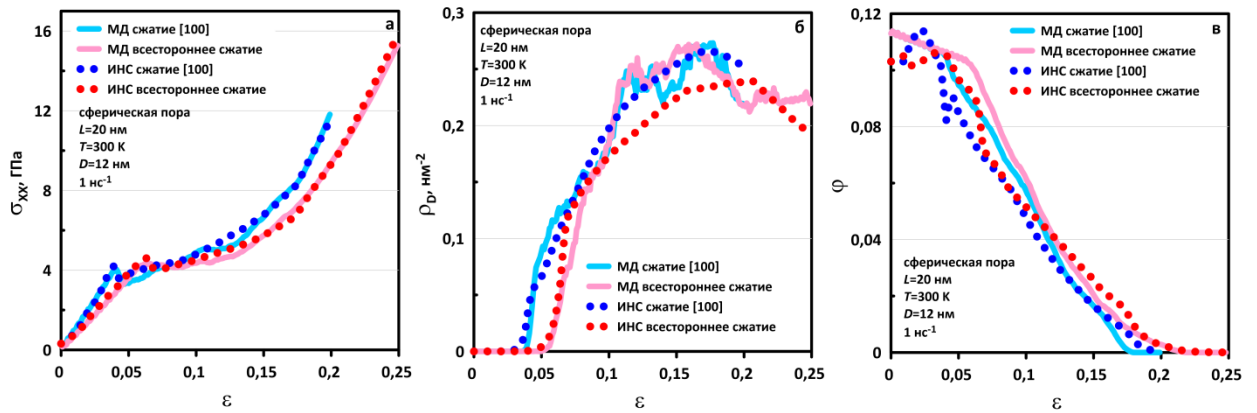


Рис. 3.3. Прогноз ИНС в сравнении с эталонными данными МД моделирования для случая сжатия системы со сферической порой диаметром 12 нм при температуре 300 К. Показана эволюция напряжений (а), плотности дислокаций (в) и пористости (г) с приложенной деформацией.

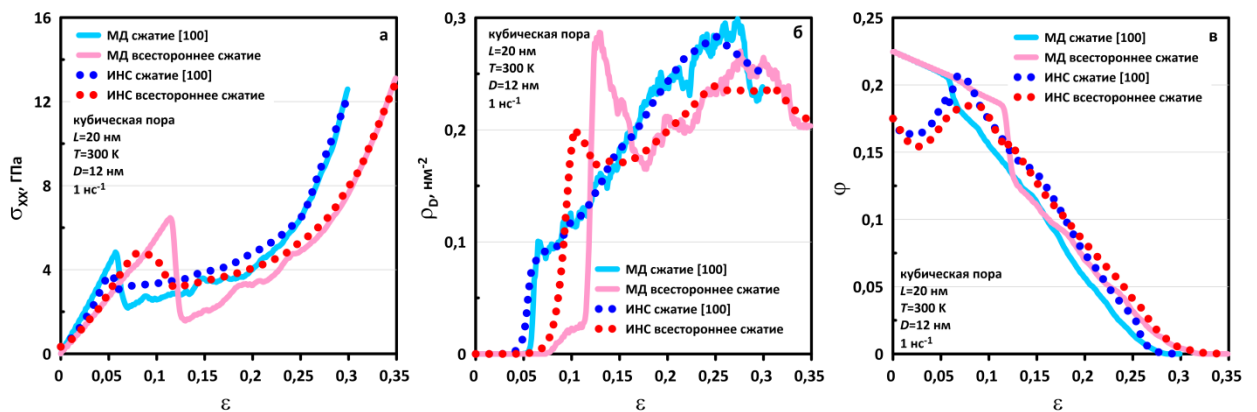


Рис. 3.4. Прогноз ИНС в сравнении с эталонными данными МД моделирования для случая сжатия системы с кубической порой с длиной ребра 12 нм при при температуре 300 К. Показана эволюция напряжений (а), плотности дислокаций (в) и пористости (г) с приложенной деформацией.

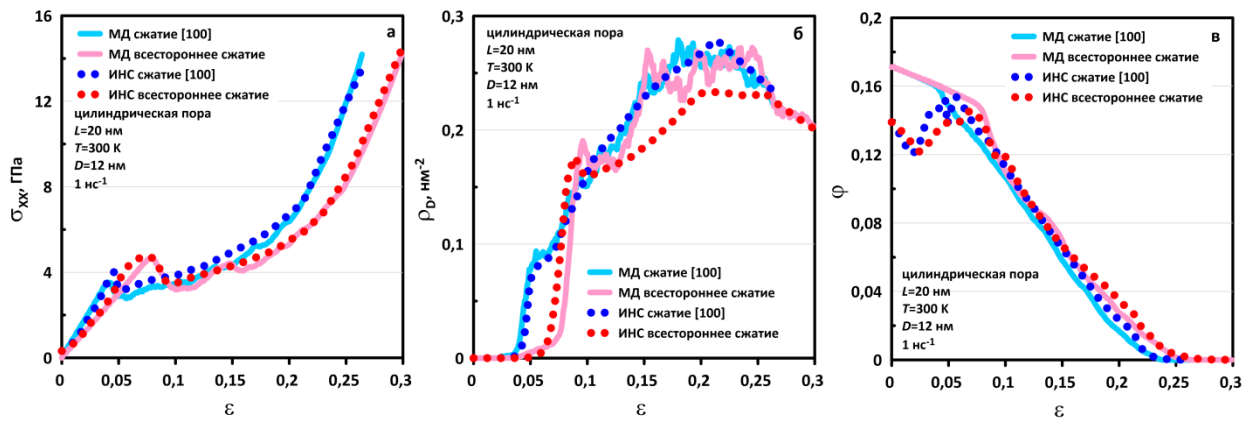


Рис. 3.5. Прогноз ИНС в сравнении с эталонными данными МД моделирования для случая сжатия системы с цилиндрической порой с высотой и диаметром основания равным 12 нм при температуре 300 К. Показана эволюция напряжений (а), плотности дислокаций (в) и пористости (г) с приложенной деформацией.

Результаты аппроксимации ИНС кривых напряжений для случая сжатия пористого магния представлены на рис. 3.6. Сравнение проводилось для размеров пор 4 и 16 нм их обучающего набора.

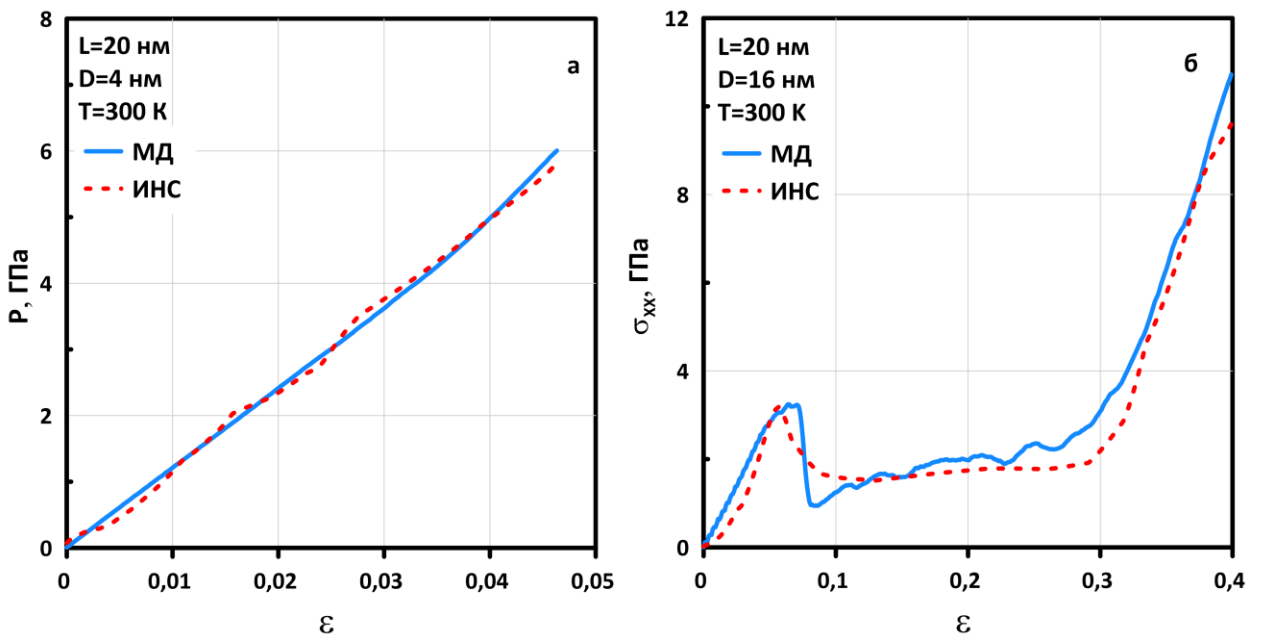


Рис. 3.6. Аппроксимация ИНС в сравнении с обучающими данными МД моделирования для случая нанопористого магния. Показана эволюция напряжений в случае всестороннего (а) и одноосного $[2\bar{1}\bar{1}0]$ (б) сжатия, для систем с порами диаметром 4 нм (а) и 16 нм (б).

Порог эмиссии дислокаций в алюминии

Даже в сплошном монокристалле порог зарождения дислокаций резко зависит от условий нагружения [125]. Появление элементов микроструктуры, таких как нанопустоты, еще больше усложняет закономерности процесса зарождения дислокаций. На рис. 3.7, собраны данные МД о пороговой деформации нуклеации для всех исследованных систем, включая различные формы и размеры нанопустот и различные температуры системы. Приведена инженерная деформация, но она однозначно отражает момент зарождения дислокаций и начало пластического течения.

Согласно рис. 3.7, пластическое течение активируется в диапазоне деформаций от 0,026 до 0,108 при 300 К, а пороговые деформации существенно ниже при 900 К и варьируются в диапазоне от 0,08 до 0,044. При 300 К наблюдается тенденция к более позднему началу пластической деформации для случая всестороннего сжатия. Для всех систем характерно уменьшение пороговой деформации с ростом температуры. Это объясняется как увеличением интенсивности тепловых флуктуаций, так и снижением энергетического барьера, определяемого упругими константами, как предсказывает теория зарождения дислокаций [125]. С повышением температуры особенно быстрое снижение пороговой деформации наблюдается для систем, содержащих крупные поры. Для сферической и кубической поры одноосная деформация со сжатием приводит к уменьшению значения деформации эмиссии дислокаций. В случае цилиндрической поры одноосная деформация вдоль оси цилиндра также характеризуется небольшой величиной деформации эмиссии дислокаций; однако при сжатии в направлении, перпендикулярном оси цилиндра, пороговые деформации близки к случаю всестороннего сжатия.

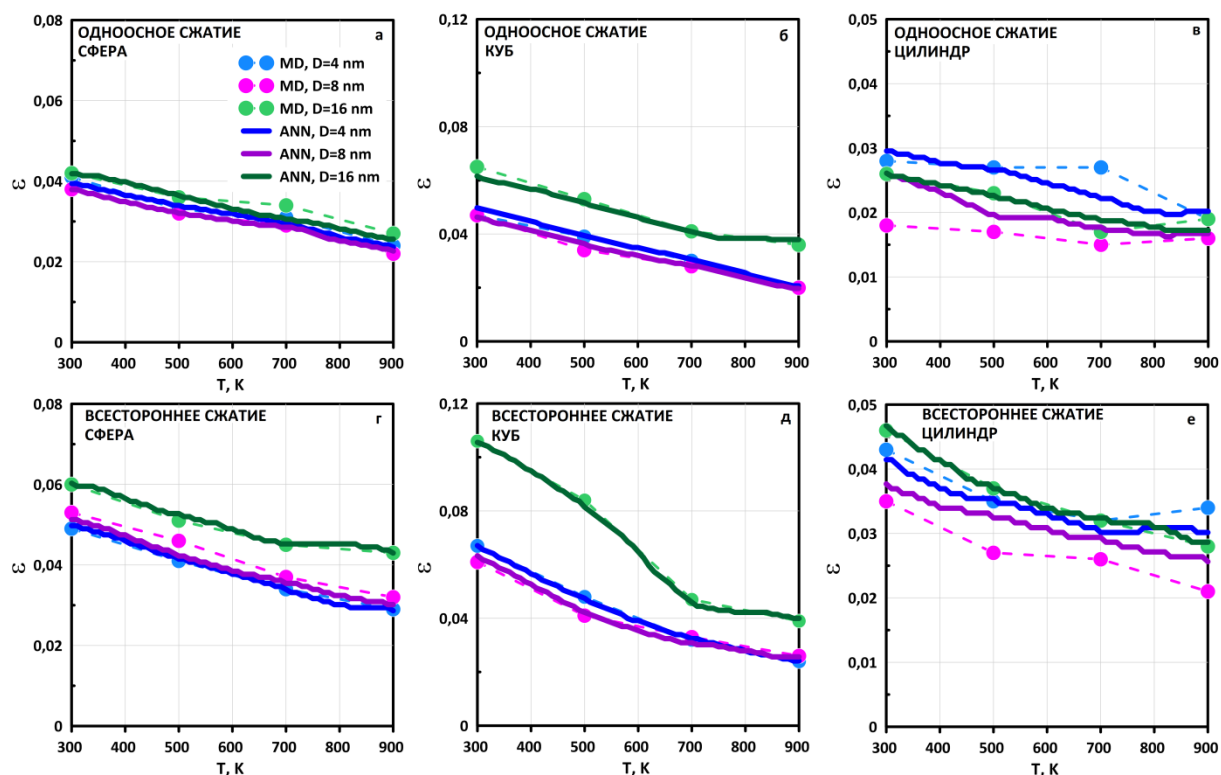


Рис. 3.7. Зависимость деформации эмиссии дислокаций от температуры для пор различной формы и размеров (4, 8 и 16 нм) при одноосном сжатии вдоль кристаллографического направления $[100]$ и при всестороннем сжатии. Сплошные линии – аппроксимация ИНС, кружки – данные МД.

Сравнивая кривые на рис. 3.7, можно сделать вывод, что порог зарождения пластической деформации является самым высоким для кубической поры с плоскими гранями и самым низким для цилиндрической поры. Этот вывод подтверждает наше предыдущее наблюдение, что плоские поверхности менее подвержены эмиссии дислокаций, чем округлые.

3.3. Микромеханическая модель

Большинство моделей пористой среды предполагают ее изотропность [125,126]. С другой стороны, даже изначально сферические поры при одноосной деформации пористого металла принимают форму эллипсоида. Таким образом, изменение пористости и ее влияние на деформированное состояние конденсированной фазы между порами становятся анизотропными. В данном разделе представлена анизотропная трехосная

микромеханическая модель пористой среды [127], применимая для различных форм пор. В данной модели развивается подход, предложенный в работе [17] для частного случая изолированных сферических пор.

Кинематика деформации описывается с помощью градиента деформации [128], компоненты которого определяются как производные компонент вектора текущего положения \mathbf{x} материальной точки по компонентам их начального положения, заданного радиус-вектором \mathbf{X} :

$$F_{ik} = \frac{\partial x_k}{\partial X_i}. \quad (3.8)$$

Тензор градиента макроскопической деформации \mathbf{F} переводит тело из эталонной недеформированной конфигурации V_0 в текущую конфигурацию V . Обычно используется мультипликативное разложение [126,129]:

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}^e \cdot \mathbf{F}^p \cdot \mathbf{F}^d. \quad (3.9)$$

где \mathbf{F}^e упругая часть, связанная с напряжениями, \mathbf{F}^p вклад макроскопической пластичности и \mathbf{F}^d вклад изменения размера и формы пор. Уравнение (3.9) означает представление полного отображения $\mathbf{F}:V_0 \rightarrow V$ последовательностью промежуточных отображений [126]: (i) из эталонной конфигурации в конфигурацию с измененным размером и формой пор $\mathbf{F}^d:V_0 \rightarrow V_d$; (ii) дальнейшая трансформация посредством макроскопической пластичности $\mathbf{F}^p:V_d \rightarrow V_p$, что сохраняет объем тела $F_{11}^p F_{22}^p F_{33}^p = 1$, и (iii) окончательное наложение упругих деформаций $\mathbf{F}^e:V_p \rightarrow V$ создание макроскопических напряжений. Часть деформации среды, связанная с изменением пор, характеризуется \mathbf{F}^d , в то время как остальная часть

$$\mathbf{F}^s = \mathbf{F}^e \cdot \mathbf{F}^p = \mathbf{F} \cdot (\mathbf{F}^d)^{-1} \quad (3.10)$$

описывает деформацию твердой фазы.

Рассмотрим репрезентативный элемент пористой среды (аналогичный МД системе) в виде прямоугольного параллелепипеда (рис. 3.8) с длинами ребер H_1 , H_2 и H_3 по осям координат x_1 , x_2 и x_3 , соответственно.

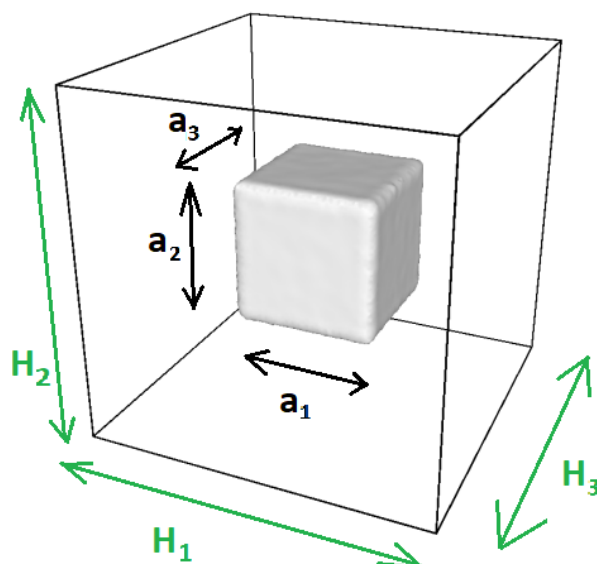


Рис. 3.8. Ячейка пористого металла с порой кубической формы.

Этот репрезентативный элемент содержит одну пору и имеет следующий объем

$$V = H_1 H_2 H_3 \quad (3.11)$$

Приложенная трехосная деформация изменяет длины, но сохраняет углы. В этом случае макроскопический градиент деформации представляет собой диагональный тензор со следующими диагональными элементами:

$$F_{11} = H_1/H_{10}, \quad F_{22} = H_2/H_{20}, \quad F_{33} = H_3/H_{30}, \quad (3.12)$$

где H_{10} , H_{20} и H_{30} – соответствующие начальные длины ребер. Отношение текущего объема V к начальному $V_0 = H_{10} H_{20} H_{30}$ равно

$$\frac{V}{V_0} = F_{11} F_{22} F_{33}. \quad (3.13)$$

Предположим, что в течение всего процесса уплотнения, объем пор может быть выражен как $V^d = \kappa a_1 a_2 a_3$, где a_1 , a_2 и a_3 , – линейные размеры пор вдоль соответствующих осей координат; κ постоянный параметр, зависящий от конкретной формы пор. Например, $\kappa = 1$ для прямоугольного параллелепипеда, $\kappa = \pi/4$ для цилиндра с эллиптическим основанием и $\kappa = \pi/6$ для эллипсоида. Текущий объем твердой фазы между порами равен $V^s = H_1 H_2 H_3 - \kappa a_1 a_2 a_3$, а начальный равен $V_0^s = H_{10} H_{20} H_{30} - \kappa a_{10} a_{20} a_{30}$. Тогда можно написать следующее выражение для объема твердой фазы:

$$\frac{V^s}{V_0^s} = F_{11}^s F_{22}^s F_{33}^s = \frac{1}{V_0^s} (H_1 H_2 H_3 - \kappa a_1 a_2 a_3). \quad (3.14)$$

Производная по времени от уравнения (3.14) дает

$$\begin{aligned} \dot{F}_{11}^s F_{22}^s F_{33}^s + F_{11}^s \dot{F}_{22}^s F_{33}^s + F_{11}^s F_{22}^s \dot{F}_{33}^s &= \frac{1}{V_0^s} (\dot{H}_1 H_2 H_3 - \kappa \dot{a}_1 a_2 a_3) + \\ &+ \frac{1}{V_0^s} (H_1 \dot{H}_2 H_3 - \kappa a_1 \dot{a}_2 a_3) + \frac{1}{V_0^s} (H_1 H_2 \dot{H}_3 - \kappa a_1 a_2 \dot{a}_3). \end{aligned} \quad (3.15)$$

Основное допущение модели в части кинематики состоит в следующем. Будем считать, что компонента \dot{F}_{ii}^s деформации твердой фазы определяется только изменением размера системы и размера пор вдоль i -ой оси. Это предположение позволяет разложить уравнение (3.15) на три независимых выражения:

$$\begin{aligned} \dot{F}_{11}^s &= \frac{1}{V_0^s F_{22}^s F_{33}^s} (\dot{H}_1 H_2 H_3 - \kappa \dot{a}_1 a_2 a_3), \\ \dot{F}_{22}^s &= \frac{1}{V_0^s F_{11}^s F_{33}^s} (H_1 \dot{H}_2 H_3 - \kappa a_1 \dot{a}_2 a_3), \\ \dot{F}_{33}^s &= \frac{1}{V_0^s F_{11}^s F_{22}^s} (H_1 H_2 \dot{H}_3 - \kappa a_1 a_2 \dot{a}_3). \end{aligned} \quad (3.16)$$

Производная макроскопического градиента деформации по времени $\dot{\mathbf{F}} = \dot{\mathbf{F}}^s \cdot \mathbf{F}^d$ равна

$$\dot{\mathbf{F}} = \dot{\mathbf{F}}^s \cdot \mathbf{F}^d + \mathbf{F}^s \cdot \dot{\mathbf{F}}^d \quad (3.17)$$

С учетом диагонального вида всех тензоров градиента деформации в рассматриваемой задаче уравнение (3.17) можно переформулировать для диагональных компонент

$$\dot{F}_{ii}^d = \dot{F}_{ii}^s F_{ii}^d + F_{ii}^s \dot{F}_{ii}^d. \quad (3.18)$$

Объединения уравнения (3.16) и (3.18), можно вывести следующие уравнения кинематики для градиента деформации повреждения:

$$\dot{F}_{11}^d = \frac{\dot{F}_{11}^s}{F_{11}^s} \left[1 - F_{11}^d F_{22}^d F_{33}^d \frac{V_0}{V_0^s} \right] + \frac{\kappa \dot{a}_1 a_2 a_3}{F_{11}^s F_{22}^s F_{33}^s} \frac{F_{11}^d}{V_0^s}, \quad (3.19)$$

$$\dot{F}_{22}^d = \frac{\dot{F}_{22}}{F_{22}^s} \left[1 - F_{11}^d F_{22}^d F_{33}^d \frac{V_0}{V_0^s} \right] + \frac{\kappa a_1 \dot{a}_2 a_3}{F_{11}^s F_{22}^s F_{33}^s} \frac{F_{22}^d}{V_0^s},$$

$$\dot{F}_{33}^d = \frac{\dot{F}_{33}}{F_{33}^s} \left[1 - F_{11}^d F_{22}^d F_{33}^d \frac{V_0}{V_0^s} \right] + \frac{\kappa a_1 a_2 \dot{a}_3}{F_{11}^s F_{22}^s F_{33}^s} \frac{F_{33}^d}{V_0^s}.$$

Эти уравнения связывают эволюцию градиента деформации повреждения с изменениями градиента макроскопической деформации и размера пор. Уравнение (3.19) также может учитывать различие реакции материала на рост/уплотнение пор в разных направлениях. В дальнейшем будем рассматривать осесимметричную деформацию с $H_2 = H_3$ и $a_2 = a_3$.

Эволюцию градиента пластической деформации можно выразить через градиент скорости \mathbf{L}^p , связанный с пластической деформацией [126,130]

$$\dot{\mathbf{F}}^p = \mathbf{L}^p \cdot \mathbf{F}^p. \quad (3.20)$$

Для рассматриваемой симметрии задачи можно написать

$$\mathbf{L}^p = \begin{pmatrix} \dot{w} & 0 & 0 \\ 0 & -\dot{w}/2 & 0 \\ 0 & 0 & -\dot{w}/2 \end{pmatrix}, \quad (3.21)$$

где \dot{w} равна нулю в случае всестороннего (объемного) сжатия или осевой составляющей скорости пластической деформации в случае одноосного нагружения. Уравнения (3.20) и (3.21) приводят к следующим дифференциальным по времени уравнениям:

$$\dot{F}_{11}^p = \dot{w} F_{11}^p, \quad \dot{F}_{22}^p = -\frac{\dot{w}}{2} F_{22}^p. \quad (3.22)$$

Диагональные компоненты упругого градиента следуют из уравнения (3.9) в виде:

$$F_{11}^e = \left(F_{11}^p F_{11}^d \right)^{-1} F_{11}, \quad F_{22}^e = F_{33}^e = \left(F_{22}^p F_{22}^d \right)^{-1} F_{22}. \quad (3.23)$$

Они определяют компоненты тензора деформации Грина-Лагранжа [128]:

$$E_{11} = (1/2) \left[\left(F_{11}^e \right)^2 - 1 \right], \quad E_{22} = (1/2) \left[\left(F_{22}^e \right)^2 - 1 \right] \quad (3.24)$$

и макроскопические напряжения в твердой фазе, по закону Гука:

$$\begin{aligned}\sigma_{11}^s &= \left[(K + 4G/3)E_{11} + 2(K - 2G/3)E_{22} \right], \\ \sigma_{22}^s &= \left[(K - 2G/3)E_{11} + 2(K + G/3)E_{22} \right],\end{aligned}\quad (3.25)$$

где G — модуль сдвига, а K — объемный модуль упругости. Усредненные напряжения в объеме равны:

$$\sigma_{11} = (1 - \varphi)\sigma_{11}^s, \quad \sigma_{22} = (1 - \varphi)\sigma_{22}^s, \quad (3.26)$$

где $\varphi = V^d/V$ пористость. Множитель $(1 - \varphi)$ в уравнении (3.26), необходим в связи с тем, что напряжения (3.25) создаются внутри упруго деформируемого материала, занимающего эту часть общего объема.

Для замыкания модели необходимо определить среднюю скорость пластической деформации $\dot{\omega}$ и скорость схлопывания пор, определяемую двумя независимыми скоростями изменения размера: \dot{a}_1 and $\dot{a}_2 = \dot{a}_3$. Скорость пластической деформации рассчитывается на основе модифицированной модели релаксации Максвелла, предложенной в [131]:

$$\dot{\omega} = \eta^{-1} \left(\frac{3}{4}S - \frac{1}{2}Y \cdot \text{sign}(S) \right) \Theta \left(\frac{3}{4}|S| - \frac{1}{2}Y \right), \quad (3.27)$$

где $S = (2/3)(\sigma_{11}^s - \sigma_{22}^s)$ девиатор напряжений, $\Theta(\bullet)$ — ступенчатая функция Хевисайда, Y статический предел текучести, который зависит от плотности дислокаций ρ_D по закону упрочнения Тейлора:

$$Y = \alpha G b \sqrt{\rho_D}, \quad (3.28)$$

и η коэффициент вязкости, который пропорционален времени релаксации и обратно пропорционален плотности дислокаций [132]:

$$\eta^{-1} = \frac{b^2 \rho_D}{4B}. \quad (3.29)$$

В уравнениях (3.28) и (3.29), b — модуль вектора Бюргерса дислокаций, α — коэффициент упрочнения и B — коэффициент трения дислокаций.

Рассмотрим изменение размера пор. Следуя концепции, введенной [63], выделяют пластически стабилизированную форму пор, характеризующуюся размерами a_1^p и $a_2^p = a_3^p$, которые отличаются от текущих размеров a_1 и

$a_2 = a_3$. Кроме перехода от уравнения (3.15) к уравнению (3.16), другим существенным приближением модели является использование формул, полученных в [63] для случая сферической поры, для оценки разницы между текущим и пластически стабилизированным размерами

$$a_{1,2} = \left(a_{1,2}^p - \frac{\gamma}{G} \right) \left[1 + P \left(\frac{1}{4G} + \frac{1}{3K} \right) \right]^{-1}, \quad (3.30)$$

а также касательного напряжения, τ_1 и τ_2 , в непосредственной близости от пор, вызывающего пластический коллапс пор

$$\tau_{1,2} = 3G \left(1 + \frac{P}{3K} - \frac{Ga_{1,2}^p}{Ga_{1,2}^p - \gamma} \left[1 + P \left(\frac{1}{4G} + \frac{1}{3K} \right) \right] \right), \quad (3.31)$$

где $P = -(1-\varphi)(\sigma_{11} + 2\sigma_{22})/3$ среднее давление в образце, γ коэффициент поверхностного натяжения.

Скорость изменения размера пор пропорциональна скорости пластической деформации схлопывания поры $\dot{w}_{1,2} < 0$:

$$\dot{a}_{1,2}^p = a_{1,2}^p \dot{w}_{1,2}, \quad (3.32)$$

где толщина зоны пластического течения считается равной как $a_{1,2}^p$. Скорость пластической деформации в окрестности пор определяется аналогично уравнению (3.27) для средней скорости пластической деформации:

$$\dot{w}_{1,2} = \eta^{-1} \left(\tau_{1,2} - \frac{1}{2} Y \cdot \text{sign}(\tau_{1,2}) \right) \Theta \left(\left| \tau_{1,2} \right| - \frac{1}{2} Y \right), \quad (3.33)$$

но напряжение сдвига $\tau_{1,2} < 0$ в данном случае связано с полем напряжений вокруг поры (3.31).

Последним пунктом модели является кинетическое уравнение для плотности дислокаций, которое включает вклады, как среднего пластического течения \dot{w} , так и пластического схлопывания пор \dot{w}_p :

$$\dot{\rho}_D = \frac{1}{\varepsilon_m} \left((\tau_1 \dot{w}_1 + \tau_2 \dot{w}_2) \frac{\varphi}{2} + \frac{3}{2} S \dot{w} \right) - k_a \rho_D \left((|\dot{w}_1| + |\dot{w}_2|) \frac{\varphi}{2} + |\dot{w}| \right) + q_n, \quad (3.34)$$

где ε_m эффективная энергия образования дислокационной линии единичной длины (энергия размножения дислокаций), k_a коэффициент аннигиляции и q_n скорость зарождения (эмиссии) дислокаций. Множитель φ учитывает тот факт, что пластическая деформация при схлопывании поры происходит в объеме, сравнимом с объемом поры. В монокристаллическом материале зарождение (испускание) дислокаций с поверхности пор вызывает пластическое течение и схлопывание пор. Скорость нуклеации дислокаций описывается аналогично [133]:

$$q_n = \sum_j \frac{\pi a_c}{H_1 H_2^2} \delta(t - t_j). \quad (3.35)$$

где $a_c = \varepsilon_n / (b\tau_n)$ есть критический радиус дислокационной петли, ε_n – энергия нуклеации, $\tau_n = 3|S|/4 + \max\{|\tau_1|, |\tau_2|\}$ – максимальное полное напряжение сдвига вблизи поверхности поры, $\delta(\bullet)$ дельта-функция Дирака и t_j момент времени зарождения, которые определяются условием:

$$\int_{t_{j-1}}^{t_j} \frac{2\pi a_1^p a_2^p b c_t}{a_c^1} \exp\left(\frac{\pi \varepsilon_n a_c}{2k_B T}\right) dt = 1. \quad (3.36)$$

$c_t = \sqrt{G/\rho}$ где поперечная скорость звука, ρ – плотность твердого материала, T – температура и k_B – постоянная Больцмана.

Плотность массы и связанная с ней инертность в настоящей модели не учитываются, поскольку преобладает упругопластическое поведение. В предыдущих исследованиях [135,136] было показано, что микроинерция существенна для пор микромерного размера, но незначительна для нанопор.

Разработанная микромеханическая модель содержит ряд допущений, как указано выше. Это компромисс между простотой и адекватностью описания уплотнения пор в металле. Подобно другим моделям с упрощенным описанием сложного процесса, разработанная модель содержит неизбежные приближения, в том числе уравнения (3.30) и (3.31), полученные для сферических пор в [63], но использованные в данной работе и для других

форм пор. С другой стороны, модель в достаточной степени отражает основные процессы, такие как пластическое схлопывание пор и деформацию матрицы. Недостатки микромеханической модели могут быть частично преодолены путем подбора оптимальных параметров.

3.4. Байесовская идентификация параметров и сравнение результатов микромеханической модели и МД данных сжатия пористого алюминия

Перспективным подходом является обучение микромеханической модели на большом наборе данных МД моделирования путем автоматического подбора оптимальных параметров. В отличие от ИНС, микромеханическая модель явно учитывает физические процессы компактирования пор и развития пластической деформации в материале в целом. Поэтому она содержит много меньше параметров.

Следуя [17,137], в работе был использован байесовский алгоритм для автоматической оптимизации параметров модели: коэффициента поверхностного натяжения γ , энергии размножения дислокаций ε_m , энергии нуклеации дислокаций ε_n , коэффициента упрочнения α , и коэффициента аннигиляции дислокаций k_a путем сравнения с эталонным набором данных, который взят из МД.

Множество наборов параметров оцениваемых генерируется случайным образом в пределах некоторого предполагаемого диапазона. Прогноз микромеханической модели для каждого набора параметров сравнивается с эталонными данными, которые в нашем случае являются результатами МД. Степень соответствия характеризуется вероятностью p , которая априорно предполагается единичной для каждого набора параметров и при сравнении с МД уменьшается в соответствии с разницей между микромеханической моделью и МД по следующей формуле:

$$p = \prod_{k=1, k_0} \exp \left\{ -0.01 \cdot \left[\left(\frac{\varphi^{\text{model}} - \varphi^{\text{MD}}}{\Delta \varphi^{\text{MD}}} \right)^2 + \left(\frac{\sigma_{11}^{\text{model}} - \sigma_{11}^{\text{MD}}}{\Delta \sigma_{11}^{\text{MD}}} \right)^2 + \left(\frac{\sigma_{22}^{\text{model}} - \sigma_{22}^{\text{MD}}}{\Delta \sigma_{22}^{\text{MD}}} \right)^2 + \left(\frac{\rho_D^{\text{model}} - \rho_D^{\text{MD}}}{\Delta \rho_D^{\text{MD}}} \right)^2 \right] \right\} \quad (3.24)$$

где $\Delta \varphi^{\text{MD}}$, $\Delta \sigma_{11}^{\text{MD}}$, $\Delta \sigma_{22}^{\text{MD}}$ и $\Delta \rho_D^{\text{MD}}$ – диапазоны соответствующих значений из МД, k_0 это количество тренировочных точек из МД. Сравнение проводится с шагом 0,005 инженерной деформации по каждой траектории деформации. Все данные МД по деформации пористого алюминия для различных температур, различной формы пор и размеров 4, 8, 16 нм, а также двух различных режимов сжатия (одноосного и всестороннего) используются для подбора одного набора параметров модели.

Полученное распределение вероятности в пространстве параметров представлено на рис. 3.9. Для расчета этого распределения использовалось около 50 000 случайно выбранных наборов параметров. На рис. 3.9. хорошо видны области высокой вероятности. Любой набор параметров из этих областей дает почти оптимальный результат, который только может быть достигнут в рамках используемой микромеханической модели. Узкие области высокой вероятности означают, что используемых обучающих данных достаточно для однозначной идентификации параметров. В таблице 1 собраны выбранные значения этих параметров, близкие к оптимальным.

Параметр	Значение
γ [Дж/м ²]	1.7
ε_m [eV/b]	0.9
α	1
ε_n [eV/b]	0.9
k_a	17

Таблица 1. Параметры микромеханической модели определенные с помощью байесовской оптимизации.

После этапа идентификации параметров, который можно рассматривать как «обучение» микромеханической модели (машинное обучение), была проведена проверка предсказания модели для случая пор размером 12 нм, которые не используются для обучения. Сравнение модели и МД для этого случая показано на рис. 3.10.

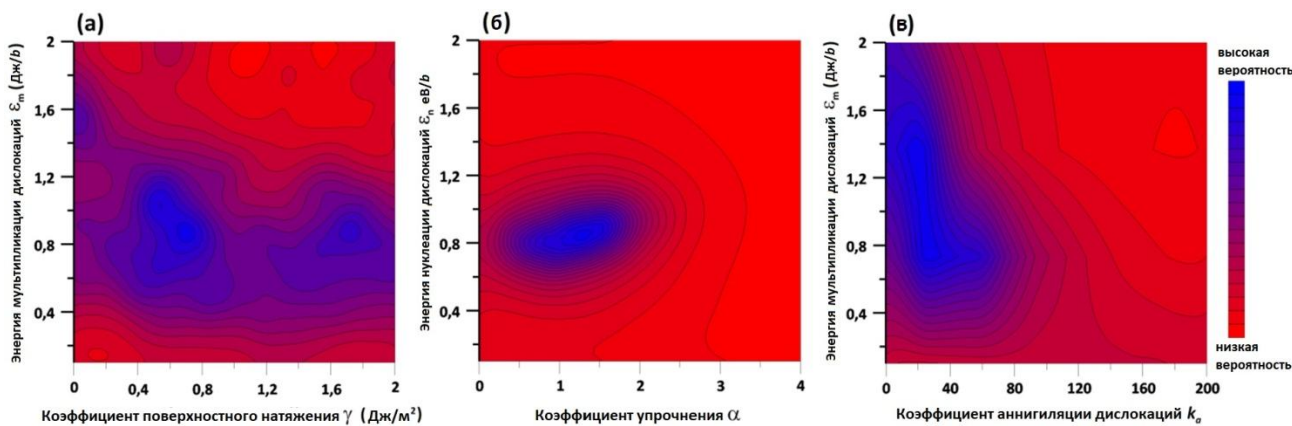


Рис. 3.9. Результаты алгоритма Байеса: распределение вероятностей в пространстве параметров.

На рис. 3.10. видно, что модель адекватно описывает сжатие нанопористого алюминия. В рассматриваемом случае относительно больших пор, рис. 3.10., модель правильно предсказывает стадию схлопывания пор с практически постоянными напряжениями и последующим быстрым ростом напряжений после достижения нулевой пористости. Подчеркнем, что все представленные результаты получены при одном и том же наборе параметров модели для всех рассматриваемых форм и диаметров пор и режимов сжатия (одноосного и всестороннего). Отклонение напряжений при больших деформациях, соответствующих нулевой пористости, возникает из-за линейной зависимости напряжение-деформация в виде закона Гука (3.25), в модели и может быть преодолено с помощью нелинейного закона, например, аппроксимированного ИНС, как в [96]. То же самое и с зарождением дислокаций: [16,95,96] ИНС может быть эффективно использована для введения информации о зарождении дислокации в модель вместо упрощенного описания с помощью уравнения (3.36). Таким образом, дальнейшее развитие микромеханической модели может быть связано с

включением ИНС для сложных зависимостей и соответствующая гибридная модель, аналогичная [16], кажется наиболее перспективной.

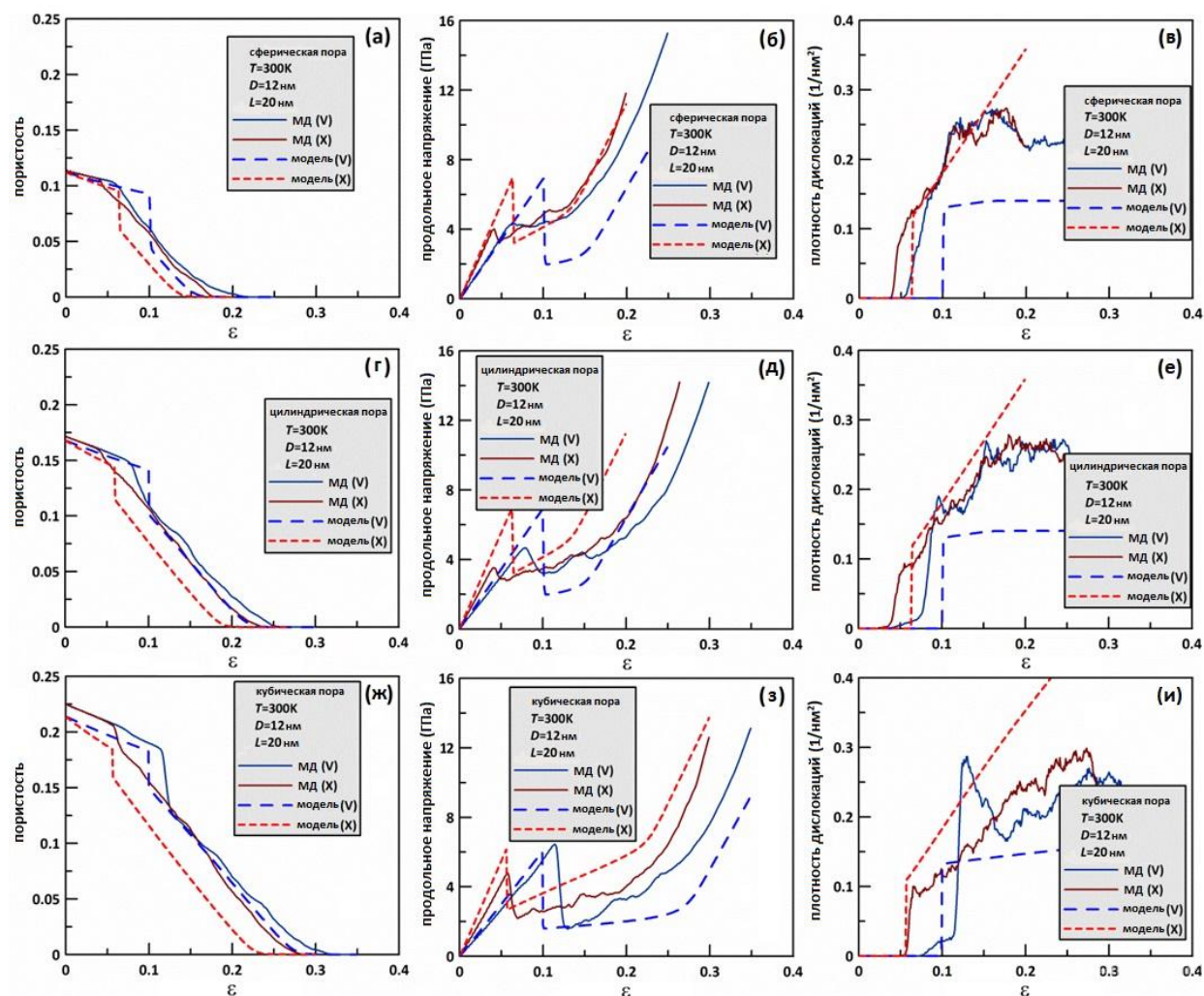


Рис. 3.10. Результаты микромеханической модели в сравнении с эталонными данными МД моделирования для случая сжатия системы с порами разной формы размером 12 нм.

3.5. Сравнение результатов континуального и МД моделирования сжатия и растяжения пористой меди

В данном разделе проводится сравнение результатов континуальной модели представленной в [133] и данных МД моделирования сжатия и растяжения пористой меди. Были определены три параметра континуальной модели, поверхностное натяжение γ , энергия эмиссии дислокаций с поверхности пор при нулевом давлении ε_{s0} и его чувствительность к

давлению k . Коэффициенты были определены для каждой исследуемой температуры для получения наилучшего соответствия данным МД для эволюции, как радиуса пор, так и давления в системе для скорости деформации 1 нс^{-1} . В данном случае использовался метод наименьших квадратов с перебором параметров модели с дискретным шагом по сетке. Такой метод является менее эффективным, чем статистический метод Байеса, рассмотренный в разделе 3.4. Полученные значения параметров собраны в Таблице 2. Все остальные параметры взяты из справочных данных. Например, коэффициент трения B , необходимый для расчета скорости дислокации, определяется по моделированию движения отдельных линий дислокации. [134].

T, K	300	500	700	900	1100
$\gamma, \text{ J/m}^2$	2.2	1.9	1.7	1.5	1.2
$\varepsilon_{s0}, \text{ eV/b}$	0.8	1.1	1.2	1.3	1.4
k	4.1	4.0	3.8	3.9	4.2

Таблица 2. Значения коэффициентов поверхностного натяжения и энергии образования дислокаций.

На рис. 3.11 показаны процессы роста пор и соответствующего изменения давления при 300 К и скорости деформации 1 нс^{-1} . Как обсуждалось в разделе 2.2, упругая деформация системы происходит до момента времени около 75 пс. До этого времени абсолютное значение давления монотонно возрастает, хотя радиус пор изменяется незначительно, что соответствует упругому увеличению радиуса пор. Увеличение давления

и радиуса в начальный период времени почти линейно. На этой начальной стадии деформации системы материал сохраняет идеальную решетку.

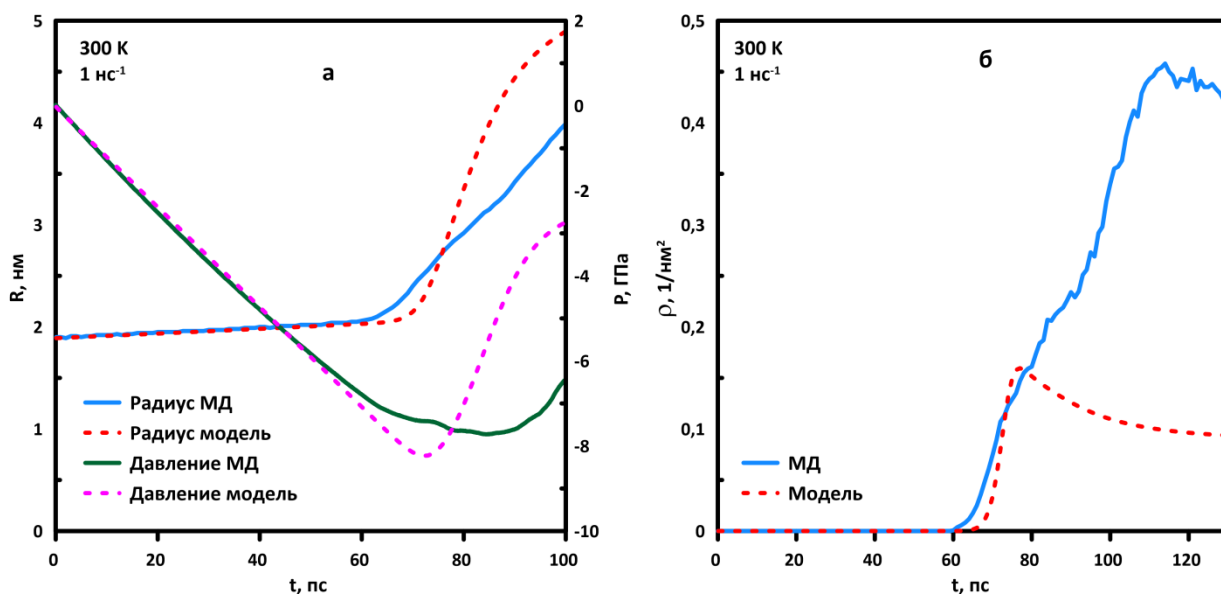


Рис. 3.11. Эволюция (а) радиуса и давления пор, (б) скалярной плотности дислокаций в меди с нанопорами для случая растяжения со скоростью деформации 1 нс^{-1} при температуре 300 К. Сплошные линии – результаты молекулярной динамики, пунктирные линии – данные микромеханической модели.

При достижении вблизи поверхности пор критического напряжения, превышающего сопротивление сдвигу материала, на поверхности начинается пластическое течение. Течение активируется при появлении первых дислокаций вблизи поры. Образовавшаяся вблизи поры полупетля дислокации начинает распространяться в материал, а ее края лежат на поверхности поры. С атомистической точки зрения происходящий элементарный атомный сдвиг приводит к присоединению дополнительного объема к поре, тем самым рост поры становится необратимым, R_p начинает увеличиваться. С континуальной точки зрения происходит релаксация сдвиговых напряжений, препятствующих изменению размера поры.

Эмиссия первых дислокаций с поверхности пор не может обеспечить достаточно высокую скорость увеличения объема пор. Давление в системе продолжает увеличиваться по абсолютной величине из-за внешней

деформации. Это влечет за собой образование новых дислокаций, что вызывает ускорение роста пор. Начинается резкое падение давления и ускорение увеличения объема пор из-за увеличения количества испущенных дислокаций и из-за их размножения (рис. 3.11 (б)). Это приводит к быстрому увеличению радиуса и падению давления. На начальном этапе скорость пластической деформации определяется в основном количеством выпускаемых дислокаций и контролируется энергией образования дислокаций на поверхности пор. В процессе развития пластического течения происходят множественные взаимодействия дислокаций и их пересечение, что приводит к активации размножения дислокаций в объеме вещества.

Процесс активного роста пор продолжается в течение примерно 45 пс от 75 до 120 пс (рис. 3.11. (а)). На этой стадии скорость роста объема пор превышает скорость роста объема системы. Вещество вокруг поры испытывает обратное сжатие, и давление растет. Можно видеть, что результаты континуального моделирования хорошо согласуются с данными МД для эволюции радиуса пор и давления, (рис. 3.11).

Сравнение кривых плотности дислокаций для различных рассмотренных скоростей деформации показано на рис. 3.12. Континуальная модель обеспечивает хорошее соответствие с МД для самой высокой скорости деформации 10 нс^{-1} и для самой низкой рассматриваемой скорости деформации $0,01 \text{ нс}^{-1}$, тогда как для промежуточных скоростей деформации плотности дислокаций различаются между моделью континуума и МД в несколько раз. Также примечательно, что континуальная модель описывает качественный переход в поведении: при сверхвысоких скоростях деформации плотность дислокаций имеет отчетливый максимум с последующим уменьшением, в то время как при более низких скоростях деформации наблюдается постепенное увеличение плотности дислокаций.

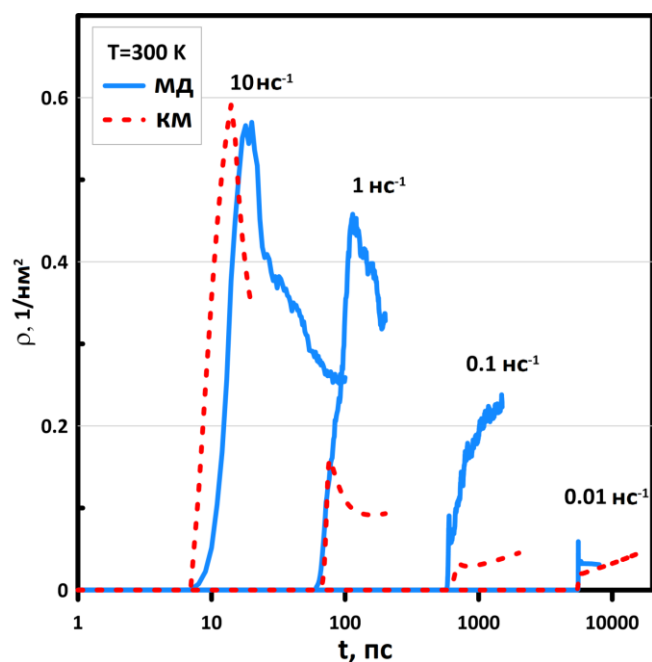


Рис. 3.12. Изменение плотности дислокаций во времени при различных скоростях деформации; температура 300 К. Растяжение пористой меди.

На рис. 3.13 показаны изменение радиуса пор и давления в пористой меди при растяжении и сжатии. Эволюция радиуса, рассчитанная с использованием континуальной модели, находится в хорошем соответствии с МД моделированием. Наибольшее различие относится к самой высокой исследуемой скорости деформации 10 нс^{-1} , где континуальная модель завышает уровень давления при уплотнении. Причина расхождения заключается в том, что модель переоценивает время, необходимое для образования дислокации и эмиссии с поверхности пор. В МД это зарождение имеет более выраженный барьерный характер и происходит при более низком напряжении сдвига. Этот вывод подтверждается результатами исследования гомогенной нуклеации дислокации в монокристаллах при простом сдвиге [138], где была выявлена более низкая зависимость скорости деформации от максимально достижимого напряжения сдвига при моделировании МД, чем в случае континуальной модели, аналогичной используемой здесь.

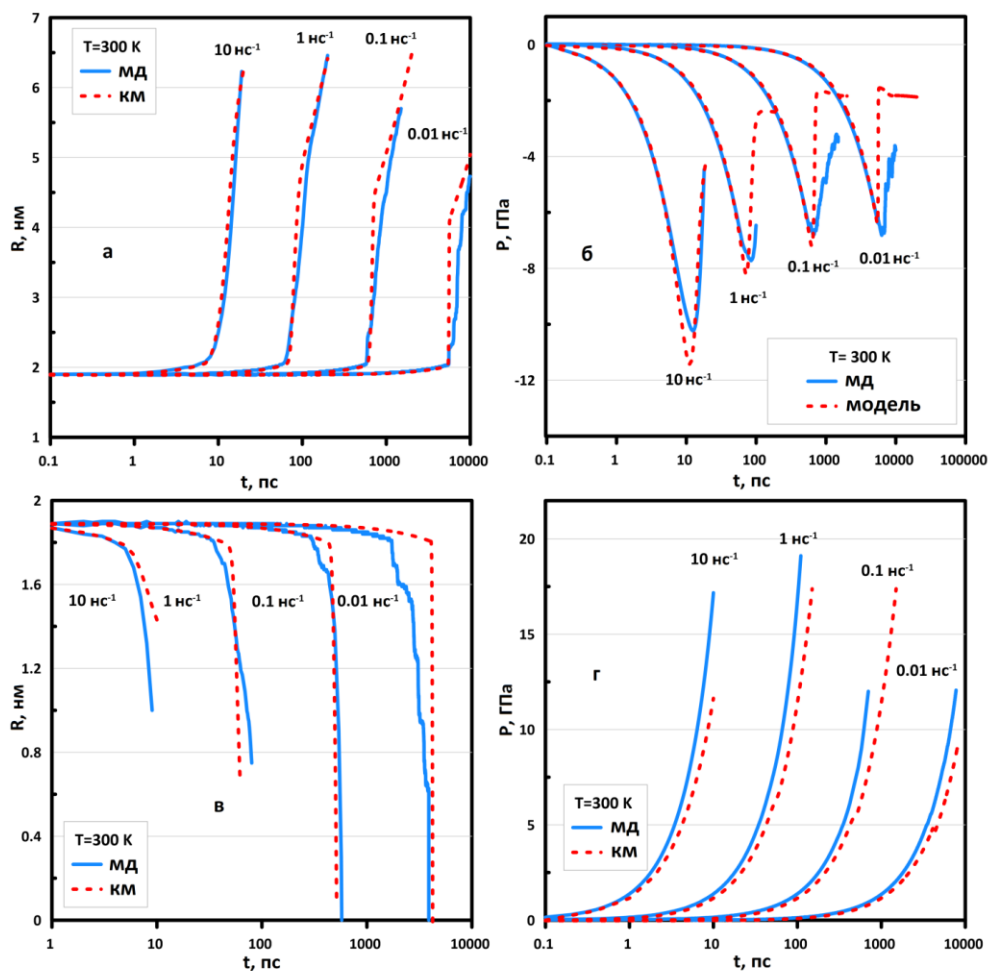


Рис. 3.13. Эволюция радиуса пор в меди при растяжении (а, б) и сжатии (в, г): результаты модели (пунктирные линии), результаты молекулярной динамики (сплошные линии) для температуры 300 К.

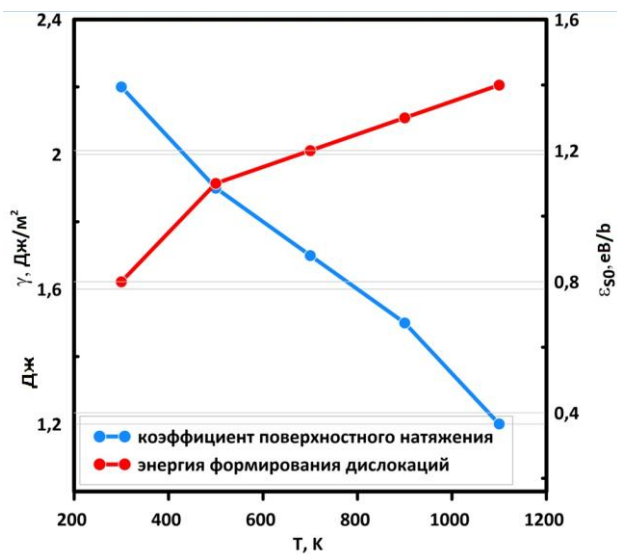


Рис 3.14. Зависимость коэффициента поверхностного натяжения и энергии зарождения дислокаций от температуры.

Вывод по третьей главе

Развиты два теоретических подхода на основе машинного обучения, искусственная нейронная сеть (ИНС) и микромеханическая модель с автоматической байесовской идентификацией параметров модели. Проведено сравнение эффективности этих подходов в применении к имитации деформационного поведения нанопористого алюминия с порами различной формы в сравнении с эталонными данными, полученными при помощи МД моделирования. Теоретический подход на основе ИНС также применен для описания сжатия по различным направлениям нанопористого магния. Для описания поведения нанопористой меди со сферическими порами при сжатии и растяжении использована упрощенная микромеханическая модель с подбором параметров по данным МД моделирования методом наименьших квадратов.

Оба теоретических подхода на основе машинного обучения показывают адекватную аппроксимацию данных МД. Сформулирована новая физически обоснованная микромеханическая модель пластического уплотнения нанопористого металла с учетом различной формы пор и анизотропии процесса уплотнения. Оба подхода, основанные на машинном обучении, могут быть далее применены в качестве определяющих уравнений нанопористого металла при макроскопическом моделировании процессов динамического уплотнения и ударно-волновых процессов в этом материале.

Глава 4. Ударные волны в нанопористом металле

4.1. Континуальное моделирование прохождения ударной волны в пористом металле

Разработанная ИНС и микромеханическая модель применяются для моделирования распространения ударной волны в нанопористом алюминии и магнии в рамках модели механики сплошной среды. Основная система законов сохранения механики сплошной среды [139] численно интегрируется по времени на пространственной сетке с использованием конечных разностей. Параллельно с этим либо ИНС, либо микромеханическая модель используются для расчета текущих напряжений в каждой ячейке числовой сетки на каждом временном шаге. В условиях одномерного движения вещества по оси x_1 с вектором скорости $\{u_1, 0, 0\}$ в плоской ударной волне законы сохранения приводят к следующим трем скалярным уравнениям:

$$\dot{\rho}^a = \rho^a \frac{\partial u_1}{\partial x_1} \quad (4.1)$$

$$\dot{u}_1 = \frac{1}{\rho^a} \frac{\partial}{\partial x_1} (\sigma_{11} + q) \quad (4.2)$$

$$\dot{E} = -(\sigma_{11} + q) \frac{\dot{\rho}^a}{(\rho^a)^2} \quad (4.3)$$

где $\rho^a = \rho \cdot (1 - \varphi)$ – средняя плотность материала. Удельная внутренняя энергия E позволяет оценить текущую температуру T следующим образом:

$$T = T_0 + (E - E_0) c_v^{-1}, \quad (4.4)$$

где c_v – удельная теплоемкость матрицы, T_0 и E_0 – начальная температура и энергия, соответственно. Соотношение текущего размера ячейки Δx_1 к начальному Δx_{10} позволяет оценить как инженерные напряжения

$$\varepsilon_{11} = \Delta x_1 / \Delta x_{10} - 1, \quad \varepsilon_{22} = \varepsilon_{33} = 0 \quad (4.5)$$

необходимые для ИНС, так и макроскопические градиенты деформации

$$F_{11} = \Delta x_1 / \Delta x_{10}, \quad F_{22} = F_{33} = 1 \quad (4.6)$$

требуемые для микромеханической модели. На каждом временном шаге после интегрирования законов сохранения, представленных уравнениями (4.2)–(4.3), либо обрабатывается ИНС, либо дифференциальные по времени уравнения микромеханической модели интегрируются отдельно в каждой ячейке пространственной сетки для расчета осевого напряжения σ_{11} и других интересующих нас параметров. Все дифференциальные уравнения по времени решаются явным методом Эйлера с шагом по времени, определяемым согласно условию Куранта–Фридрихса–Леви.

Вязкое напряжение в уравнениях (4.2) и (4.3) стабилизирует численные колебания на фронте ударной волны и делает толщину ударного фронта конечной. Следуя [140], вязкое напряжение определяется как

$$q = \eta^* \frac{\partial u_1}{\partial x_1} \quad (4.7)$$

с коэффициентом, равным $\eta^* = (3\Delta x_1)\rho^a u^{sw}$, где u^{sw} скачок скорости частицы в ударной волне. Такое значение коэффициента вязкости обеспечивает толщину ударной волны около 3 размеров ячейки в случае гидродинамического течения, а пластичность [140] и пористость в данном случае увеличивают толщину фронта ударной волны. В отличие от классической искусственной вязкости, было применено ненулевое вязкое напряжение как для сжатия, так и для расширения ячеек численной сетки. Для полного перехода к физической вязкости требуется небольшой независимый от сетки коэффициент вязкости, обеспечивающий стабильное решение на достаточно мелкой числовой сетке [140]. С другой стороны, в работе исследуется структура ударной волны, на которую больше всего влияет начальная пористость, тогда как влияние вязкости мало, и используемое приближение применимо.

4.2. МД моделирование ударно-волнового нагружения пористого металла

Результаты, основанные на микромеханической модели и ИНС, сравниваются с прямым моделированием этого процесса с помощью МД. В случае МД моделирования создаются образцы вытянутой формы длиной 600 нм по направлению ударной волны (по оси x) и сечением 20 нм \times 20 нм с периодически расположенными сферическими, цилиндрическими или кубическими порами, обеспечивающими одинаковую пористость около 11%. Сначала производится релаксация системы, приводящая к равновесному ненапряженному состоянию. После этого образцы нагружаются с левой стороны поршнем, движущимся с постоянной скоростью u^{SW} направо вдоль оси $x \equiv x_1$, а для перпендикулярных направлений задаются периодические граничные условия. Это нагружение создает плоскую ударную волну со скачком скорости u^{SW} , распространяющуюся по материалу и сжимающую нанопоры. Каждая МД система содержит около 13,3 млн. атомов; рассматриваются скорости поршня 300, 500 и 1000 м/с. Примеры атомных конфигураций в последовательные моменты времени для случаев сферических и кубических нанопор в алюминии представлены на рис. 4.1 для скачка скорости 500 м/с. Видно сжатие пор за фронтом ударной волны.

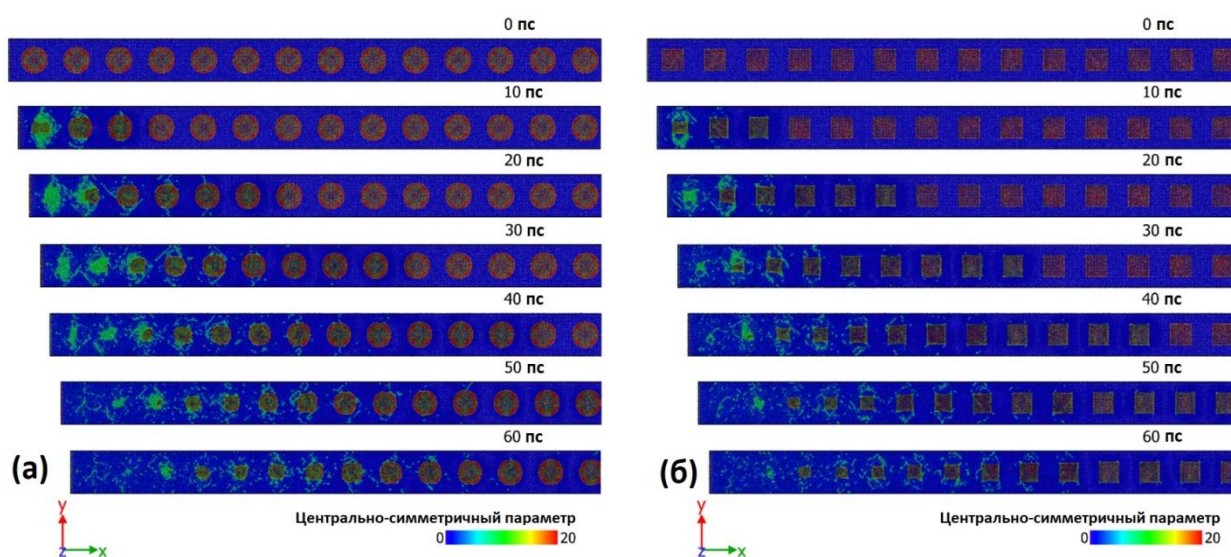


Рис. 4.1. МД-моделирование распространения ударной волны в алюминии со сферическими (а) и кубическими (б) нанопорами; начальная пористость в

обоих случаях составляет около 11%. Поршень, движущийся с левой стороны, создает ударную волну со скачком скорости 500 м/с. Схлопывание пор заканчивается за упругим предвестником и фронтом пластической ударной волны. Атомы окрашены в соответствии с центрально-симметричным параметром [141].

4.3. Сравнение результатов моделирования распространения ударной волны в пористом металле на основе двух подходов машинного обучения

Пространственные распределения напряжений, локальной скорости вещества, плотности и температуры вдоль оси x_1 рассчитаны по данным МД усреднением по поперечным слоям толщиной 4 нм. На рис. 4.2–4.4 сравнивается структура ударной волны по данным МД со структурой, предсказываемой механикой сплошной среды либо с ИНС, либо с микромеханической моделью, применяемыми как определяющее уравнение пористого алюминия. Осцилляции на МД кривых для средней плотности связаны с периодически расположенными порами в образце, а отсутствие этих колебаний означает полное уплотнение пор. Самый слабый рассматриваемый скачок скорости 300 м/с порождает упругую волну, и все три метода расчета предсказывают одноволновую структуру. Более высокие скачки скорости 500 и 1000 м/с формируют четкую двухволновую структуру с упругим предвестником и волной пластического уплотнения. В то время как более сильный удар (1000 м/с) производит быстрое полное компактирование пор на относительно тонком фронте пластической волны, умеренной скорости удара (500 м/с) соответствует плавный фронт ударного сжатия с постепенным уплотнением пор, что подтверждается атомными конфигурациями на рис. 4.1. Подобные способы уплотнения обсуждались в [17] для случая ударно-волнового сжатия нанопорошка железа, исследованного методом континуального моделирования с помощью микромеханической модели.

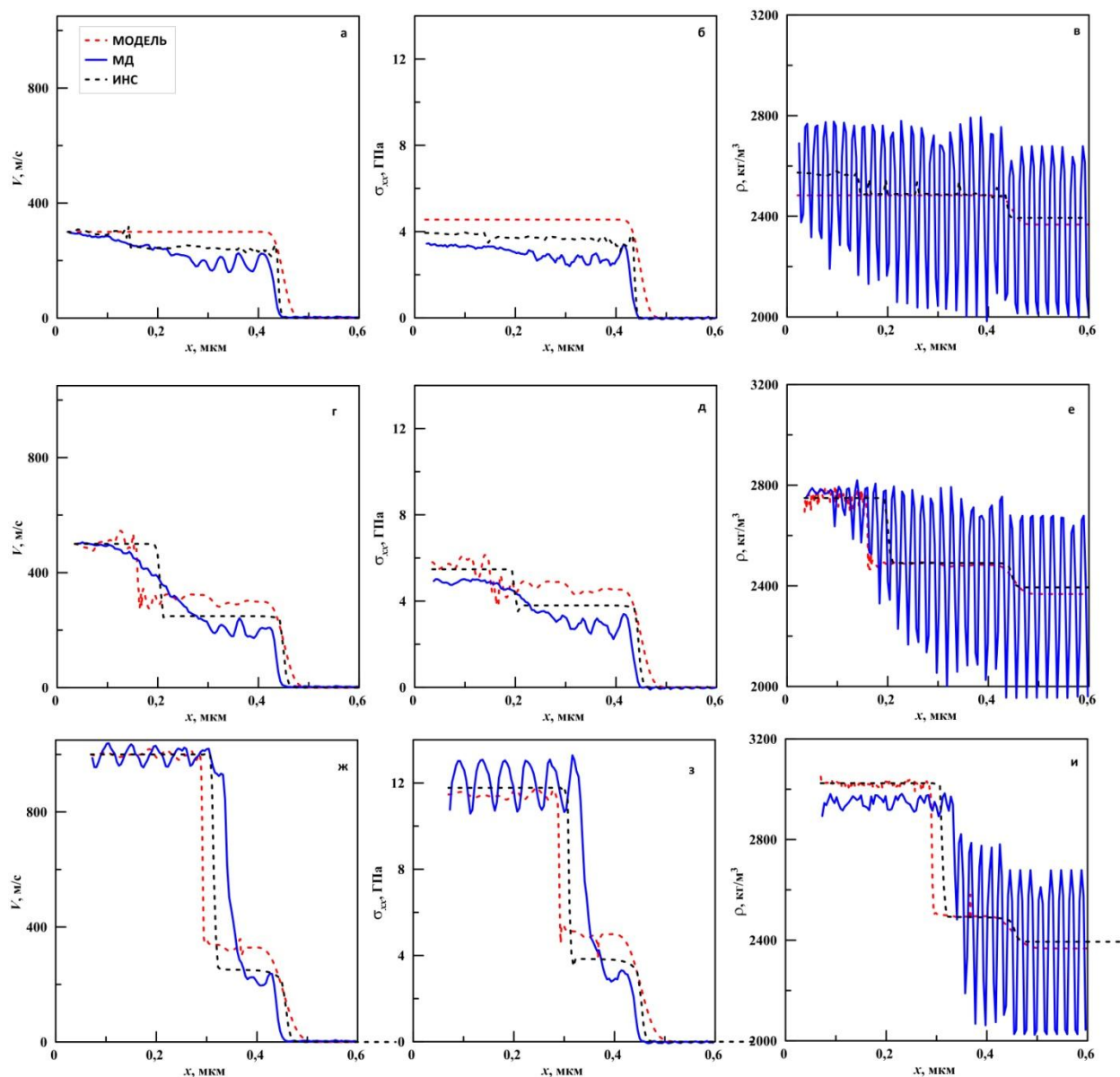


Рис. 4.2. Ударные волны со скачками скорости 300 м/с (а-в), 500 м/с (г-е) и 1000 м/с (ж-и) в алюминии со **сферическими** нанопорами с начальной пористостью 11%. Прямое МД моделирование (синие сплошные линии), непрерывное моделирование с применением ИНС (черные пунктирные линии) и непрерывное моделирование с применением микромеханической модели. Представлены распределения локальной скорости вещества (а, г, ж), продольного напряжения (б, д, з) и средней плотности материала (в, е, и).

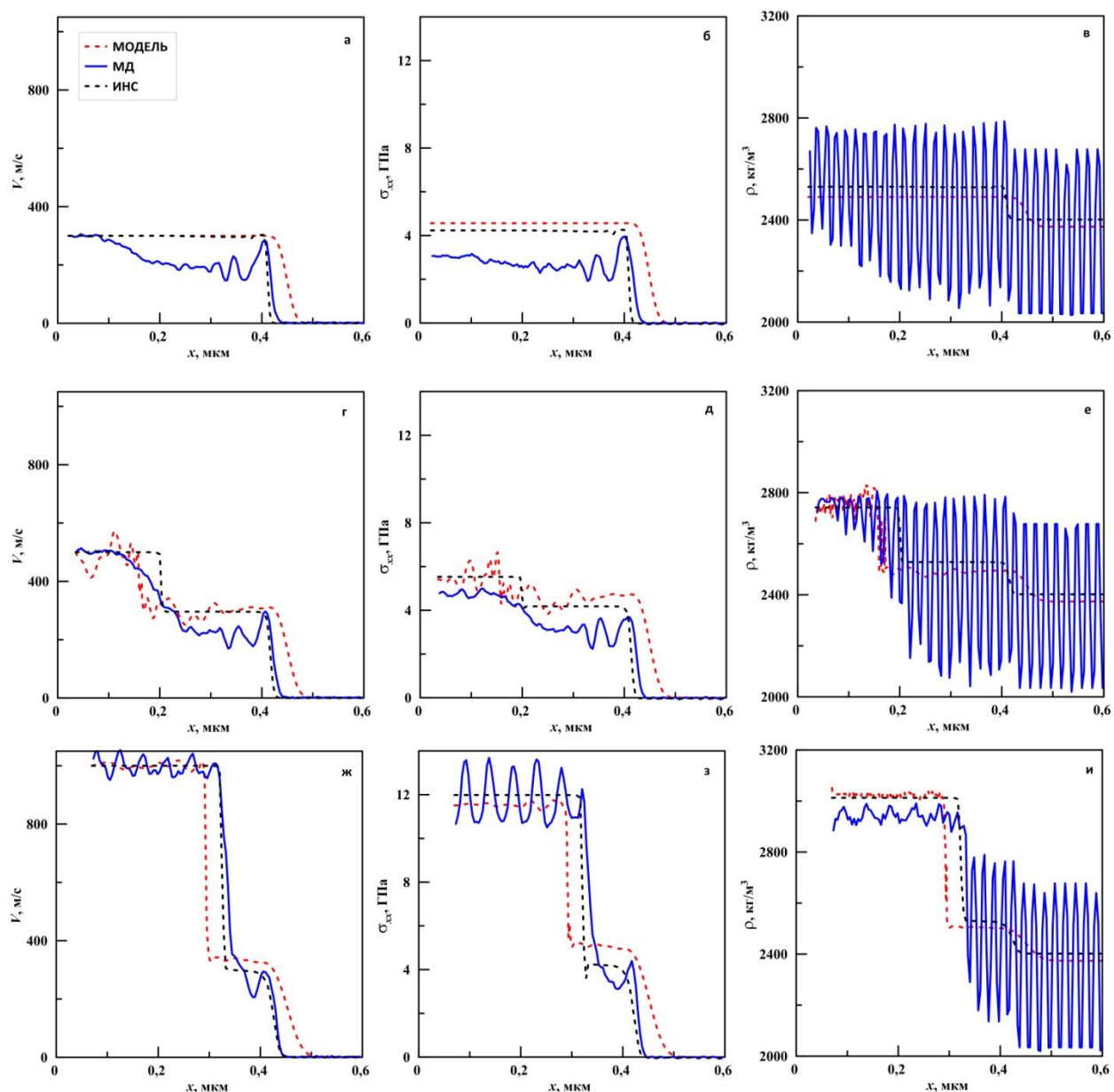


Рис. 4.3. Ударные волны со скачками скорости 300 м/с (а-в), 500 м/с (г-е) и 1000 м/с (ж-и) в алюминии с **кубическими** нанопорами с начальной пористостью 11%. Прямое МД моделирование (синие сплошные линии), континуальное моделирование с применением ИНС (черные пунктирные линии) и континуальное моделирование с применением микромеханической модели. Представлены распределения локальной скорости вещества (а, г, ж), продольного напряжения (б, д, з) и средней плотности материала (в, е, и).

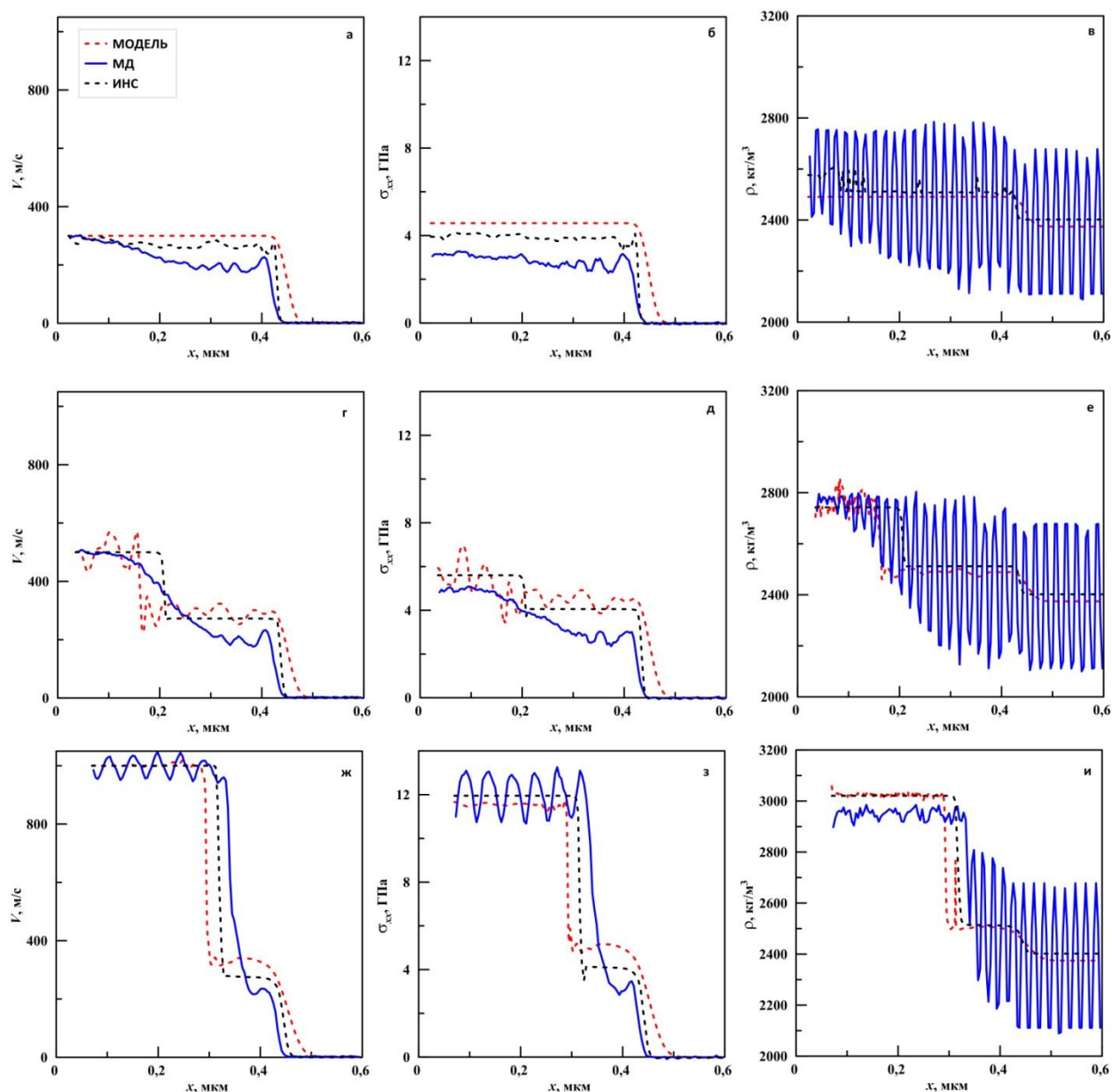


Рис. 4.4. Ударные волны со скачками скорости 300 м/с (а-в), 500 м/с (г-е) и 1000 м/с (ж-и) в алюминии с **цилиндрическими** нанопорами (сжатие вдоль оси цилиндра) с начальной пористостью 11%. Прямое МД моделирование (синие сплошные линии), континуальное моделирование с применением ИНС (черные пунктирные линии) и континуальное моделирование с применением микромеханической модели. Представлены распределения локальной скорости вещества (а, г, ж), продольного напряжения (б, д, з) и средней плотности материала (в, е, и).

Рис. 4.2, 4.3 и 4.4 показывают адекватное соответствие прогнозов, основанных как на ИНС, так и на микромеханической модели, с прямым МД моделированием. Следует отметить, что для обучения ИНС и параметризации микромеханической модели используются отдельные данные МД по однородной деформации представительного элемента объема. ИНС и модель не подгоняются под прямое МД моделирование ударно-волнового процесса, представленное на рис. 4.2, 4.3 и 4.4. Кроме того, скорость деформации сжатия материала на фронте ударной волны достигает 10 нс^{-1} , что на порядок выше используемой в МД моделировании для подготовки обучающих данных. Таким образом, можно трактовать эти модельные результаты как прогноз теоретической модели, подтвержденный МД моделированием для ударно-волнового процесса. Как и в главе 3, качество результатов на основе ИНС несколько лучше, чем на основе микромеханической модели, в то время как время расчета намного меньше для подхода на основе микромеханической модели. Сравнивая случаи различных форм пор, можно сделать вывод, что конкретная форма влияет лишь на некоторые детали распространения ударной волны, тогда как структура фронта ударной волны близка для всех рассмотренных форм пор.

В случае магния сравниваются только результаты МД с ИНС. На рис. 4.5 также видно хорошее соответствие между результатами. Причем самое лучшее соответствие наблюдается при предельных значениях скорости 300 и 1000 м/с.

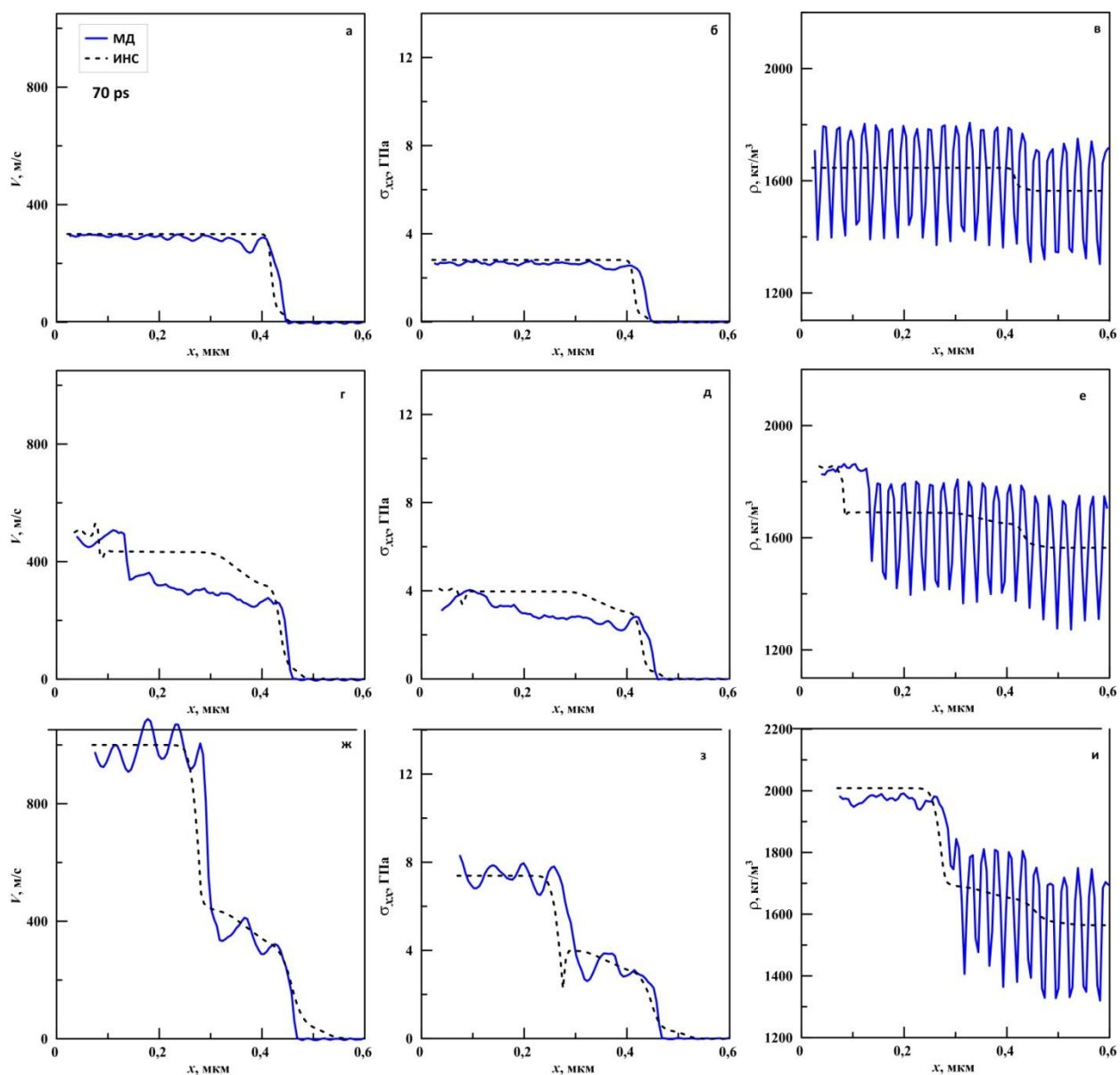


Рис. 4.5. Ударные волны со скачками скорости 300 м/с (а-в), 500 м/с (г-е) и 1000 м/с (ж-и) в магнии с начальной пористостью 10%. Прямое МД моделирование (синие сплошные линии) и континуальное моделирование с применением ИНС (черные пунктирные линии). Представлены распределения локальной скорости вещества (а, г, ж), продольного напряжения (б, д, з) и средней плотности материала (в, е, и).

Вывод по четвертой главе

Проведено моделирование распространения ударной волны в пористом алюминии и пористом магнии. Численный эксперимент на основе МД моделирования рассматривался как эталон. В случае алюминия два теоретических метода, модель механики сплошной среды с ИНС в качестве определяющего уравнения и модель механики сплошной среды с «обученной» микромеханической моделью, сравнивались с эталонными данными МД моделирования. Для магния проведено сравнение модели на основе ИНС с данными МД. В случае магния обученная ИНС учитывает анизотропию ГПУ решетки, а в случае алюминия – различную форму пор. Оба развитых теоретических метода показали хороший результат и могут использоваться в качестве определяющих уравнений пористого металла при его деформации. Результаты, полученные с помощью ИНС ближе к МД данным, но при этом вычислительное время, требуемое для микромеханической модели намного меньше. Более того, микромеханическая модель физически обоснована в отличие от искусственной нейронной сети.

Для всех рассмотренных форм пор структура ударной волны идентична, отличие лишь в небольших деталях. При малых скоростях волна распространяется в упругом режиме. При умеренных скоростях соударения обнаружены режимы с продолжающимся за фронтом ударной волны пластическим компактированием пор. Для пористых металлов, как и для сплошных материалов, характерно наличие упругого предвестника перед фронтом упругопластической ударной волны.

Заключение

В диссертации развиты два новых теоретических метода на основе машинного обучения для описания деформационного поведения нанопористых металлов. Для накопления обучающих данных проведено большое количество молекулярно-динамических симуляций деформации пористого алюминия, меди и магния.

Первый теоретический метод состоит в прямой аппроксимации деформационного поведения с помощью искусственной нейронной сети (ИНС), которая далее используется как определяющее уравнение материала. ИНС не содержит физических представлений об описываемом процессе, но большое количество параметров искусственных нейронов делает ее гибким инструментом отображения сложных зависимостей.

Второй теоретический метод состоит в формулировке микромеханической модели пластического схлопывания пор и дальнейшем ее обучении путем выбора оптимальных параметров обеспечивающих наилучшее совпадение прогноза модели и данных МД. Предложена новая микромеханическая модель роста и компактирования пор, учитывающая различную форму пор и анизотропию процесса сжатия. Для идентификации параметров модели по обучающим данным опробованы два подхода. Первый подход состоит в простом переборе параметров с дискретным шагом и оценкой соответствия модели и МД методом наименьших квадратов. Более эффективным оказался статистический метод Байеса, в котором оцениваемые наборы параметров разыгрываются случайно.

Разработанная ИНС и параметризованная микромеханическая модель применяются для моделирования распространения ударной волны в нанопористом алюминии и магнии в сравнении с прямым МД моделированием этого процесса и демонстрируют адекватное описание структуры ударной волны. Таким образом, разработанные теоретические методы на основе машинного обучения могут применяться для построения определяющих уравнений нанопористого металла.

Список публикаций автора по теме диссертации:

Статьях в журналах, входящих в системы цитирования Web of Science и Scopus и приравненных к рекомендованным ВАК Минобрнауки РФ:

1. Latypov F.T., Fomin E.V., Krasnikov V.S., Mayer A.E. Dynamics compaction of aluminum with nanopores of varied shape: MD simulations and machine-learning-based approximation of deformation behavior. // International Journal of Plasticity. – 2022 – V.156 – P. 103363.
2. Latypov F.T., Mayer A.E., Krasnikov V.S. Dynamics of growth and collapse of nanopores in copper // International Journal of Solids and Structures. – 2020. – V. 202. – P. 418–433.
3. Latypov F.T., Mayer A.E. Shear strength of metals under uniaxial deformation and pure shear // Journal of Physics: Conference Series. – 2015. – V. 653. – P. 012041.
4. Krasnikov V.S., Mayer A.E., Pogorelko V.V., Latypov F.T., Ebel A.A. Interaction of dislocation with GP zones or θ'' phase precipitates in aluminum: Atomistic simulations and dislocation dynamics // International Journal of Plasticity. – 2020. – V. 125. – P. 169-190.

Тезисы докладов научных конференций:

1. Латыпов, Ф.Т. Гомогенное зарождение дислокаций и сдвиговая прочность металлов при одноосной деформации и чистом сдвиге / Ф.Т. Латыпов // Математическое моделирование в естественных науках. Материалы XXIII Всероссийской школы-конференции молодых ученых и студентов. – 2015. – С.331.
2. Latypov, F.T. Homogeneous nucleation of dislocations in metals under uniaxial deformation and pure shear / F.T. Latypov, A.E. Mayer // XXX International Conference on Interaction of Intense Energy Fluxes with Matter. – 2015. – P.90.

3. Latypov, F.T. Molecular dynamic and continuum modelings of nanopore growth in copper at high-rate tension / F.T. Latypov, V.S. Krasnikov, A.E. Mayer //XXXI International Conference on Equations of State for Matter. –2016. – P.156.
4. Latypov, F.T. Molecular dynamic and continuum modelings of nanopore growth in copper at high-rate tension / F.T. Latypov, V.S. Krasnikov, A.E. Mayer // NCSM 30: The 30th Nordic Seminar on Computational Mechanics. – 2017. – P.111.
5. Латыпов, Ф.Т. Моделирование коллапса нанопор в металлах при высокоскоростном сжатии / Ф.Т. Латыпов // 19-я Международная конференция «Авиация и космонавтика». – 2020. – С.571.
6. Латыпов Ф.Т. Пластическое компактирование пористых металлов с разными типами кристаллических решеток / Латыпов Ф.Т., Майер А.Е., Красников В.С. // Перспективные материалы и технологии: Материалы международного симпозиума. – 2021. – С.176.
7. Латыпов Ф.Т. Моделирование сжатия пористых металлов при высокоскоростной деформации / Ф.Т. Латыпов, А.Е. Майер, Е.В. Фомин, В.С. Красников // Актуальные вопросы прочности: Сборник тезисов LXIV Международной конференции. – 2022. – С.53.
8. Латыпов Ф.Т. Динамическая деформация пористых металлов: молекулярно-динамическое исследование, теоретические модели и машинное обучение/ Ф.Т. Латыпов, А.Е. Майер, Е.В. Фомин, В.С. Красников // Физическая мезомеханика материалов. Физические принципы формирования многоуровневой структуры и механизмы нелинейного поведения: Тезисы докладов международной конференции. – 2022. – С.159.

Список литературы:

1. Kirkland N.T. Synthesis and properties of topologically ordered porous magnesium / N.T. Kirkland, I. Kolbeinsson, T. Woodfield, G.J. Dias, M.P. Staiger // *Materials Science and Engineering: B.* – 2011. – V. 176(20). – P. 1666–1672.
2. Bram, M. High-porosity titanium, stainless steel, and superalloy parts / M. Bram, C. Stiller, H.P. Buchkremer, D. Stover, H. Baur // *Advanced Engineering Materials.* – 2000. – V. 2(4) – P. 196–199.
3. Banhart, J. Production of metal foams / J. Banhart // *Comprehensive Composite Materials II.* – 2018. – V. 4. – P. 347–363.
4. Krolo, J. Production of closed-cell foams out of aluminum chip waste: mathematical modeling and optimization / J. Krolo, B. Lela, K. Grgi'c, S. Jozi'c // *Metals.* – 2022. – V. 12. – P. 933.
5. Costanza, G. Experimental set-up of the production process and mechanical characterization of metal foams manufactured by lost-pla technique with different cell morphology / G. Costanza, A. Del Ferraro, M.E. Tata // *Metals.* – 2022. – V. 12. – P. 1385.
6. Deshpande, V. Isotropic constitutive models for metallic foams / V. Deshpande, N. Fleck // *Journal of the Mechanics and Physics of Solids.* – 2000 – V. 48. – P. 1253–1283.
7. Kitazono, K. Application of mean-field approximation to elastic-plastic behavior for closed-cell metal foams / K. Kitazono, E. Sato, K. Kuribayashi // *Acta Materialia.*–2003. – V. 51. – P. 4823–4836.
8. Chen, C. Size effects in the constrained deformation of metallic foams / C. Chen, N. Fleck // *Journal of the Mechanics and Physics of Solids.* – 2002 – V. 50 – P. 955–977.
9. Jung, A. Modelling of metal foams by a modified elastic law / A. Jung, S. Diebels // *Mechanics of Materials.* – 2016. – V. 101 – P. 61–70.

10. Kadkhodapour, J. Micro–macro investigation of deformation and failure in closed-cell aluminum foams / J. Kadkhodapour, S. Raeisi // *Computational Materials Science*. – 2014. – V. 83 – P. 137–148.
11. Nammi, S. Finite element analysis of closed-cell aluminium foam under quasi-static loading / S. Nammi, P. Myler, G. Edwards // *Materials & Design*. – 2010. – V. 31 – P. 712–722.
12. Jeon, I. Finite element simulation of the plastic collapse of closed-cell aluminum foams with x-ray computed tomography / I. Jeon, T. Asahina, K.-J. Kang, S. Im, T.J. Lu // *Mechanics of Materials*. – 2010 – V. 42 – P. 227–236.
13. Kader, M. Macro and micro collapse mechanisms of closed-cell aluminium foams during quasi-static compression / M. Kader, M. Islam, M. Saadatfar, P. Hazell, A. Brown, S. Ahmed, J. Escobedo // *Materials & Design*. – 2017. – V. 118. – P. 11–21.
14. Kidger, P. Universal approximation with deep narrow networks / P. Kidger, T.J. Lyons // *Proceedings of Machine Learning Research*. – 2020. – V. 125. – P.1–22.
15. Nguyen, T. Dynamic crystal plasticity modeling of single crystal tantalum and validation using Taylor cylinder impact tests / T. Nguyen, S.J. Fensin, D.J. Luscher // *International Journal of Plasticity*. – 2021. – V. 139. – P.102940.
16. Mayer, A.E. Machine-learning-based model of elastic-plastic deformation of copper for application to shock wave problem / A.E. Mayer, M.V. Lekanov, N.A. Grachyova, E.V. Fomin // *Metals* . –2022. – V. 12 – P. 402.
17. Mayer, A.E. Micromechanical model of nanoparticle compaction and shock waves in metal powders/ A.E. Mayer // *International Journal of Plasticity*. – 2021. – V. 147. – P. 103102.
18. Moshe, E. An increase of the spall strength in aluminum, copper, and Metglas at strain rates larger than 10^7 s^{-1} / E. Moshe, S. Eliezer, E. Dekel, A.

Ludmirsky, Z. Henis, M. Werdiger, I.B. Goldberg, N. Eliaz, D. Eliezer // Journal of Applied Physics. – 1998. – V. 83(8). – P. 4004–4011.

19. Werdiger, M. Al and Cu dynamic strength at a strain rate of $5 \cdot 10^8 \text{ s}^{-1}$ / M. Werdiger, S. Eliezer, E. Moshe, Z. Henis, E. Dekel, Y. Horovitz, B. Arad // AIP Conference Proceedings. – 2002. – V. 620. – P. 583.

20. Ashby, M.M. Metal Foams: A Design Guide / M.M. Ashby, A. Evans, N.A. Fleck, J.W. Hutchinson, H.N.G. Wadley, L.J. Gibson // Butterworth Heinemann: Woburn–2002.

21. Ali, H. Effect of the manufacturing parameters on the pore size and porosity of closed-cell hybrid aluminum foams. / H. Ali, A. Gábora, M.M. Naeem, G. Kalácska, T. Mankovits // International Review of Applied Sciences and Engineering. –2021.–V. 12.–P. 230.

22. Wang, E. On multiaxial failure behavior of closed-cell aluminum foams under medium strain rates / E. Wang, G. G. Sun, Zheng, Q. Li // Thin Walled Struct. –2021. – V. 160. – P. 107278.

23. García-Moreno, F. Commercial applications of metal foams: Their properties and production / F. García-Moreno // Materials. –2016. – V. 9– P. 85.

24. Wang, E. Characterization of initial and subsequent yield behaviors of closed-cell aluminum foams under multiaxial loadings / E. Wang, G. Sun, G. Zheng, Q. Li // Composites Part B: Engineering. – 2020. – V. 202. – P. 108247.

25. Martín, E.P. Microstructural parameters affecting the compressive response of closed-cell aluminum foams / E.P. Martín // Mechanics of Advanced Materials and Structures. – 2021. – V. 28. – P. 1–20.

26. Wen, C.E. Compressibility of porous magnesium foam: dependency on porosity and pore size / C.E. Wen, Y. Yamada, K. Shimojima, Y. Chino, H. Hosokawa, M. Mabuchi // Materials Letters. – 2004. – V. 58. – P. 357–360.

27. Grilec, K. The influence of applied force on aluminium foams energy absorption / K. Grilec, I. Bunjan, S. Jakovljević // Tehnički Vjesnik. –2021. – V. 28. – P. 1388–1394.
28. Schuler, P. Deformation and failure behaviour of open cell Al foams under quasistatic and impact loading. / P. Schuler, S.F. Fischer, A. Buhrig-Polaczek, C. Fleck // Materials Science and Engineering: A. –2013. – V. 587. P. 250–261.
29. Duarte, I. Manufacturing and bending behaviour of in situ foam-filled aluminium alloy tubes/ I. Duarte, M. Vesenjaj, L. Krstulović-Opara, I. Anžel, J.M. Ferreira // Materials & Design –2015. –V. 66. – P. 532–544.
30. Hartmann, M. Fabrication and properties of syntactic magnesium foams / M. Hartmann, K. Reindel, F. Singer // Materials Research Society Symposium Proceedings. –1998. – V. 521. – P. 211–216.
31. Meyers, M.A. Dynamic Behavior of Materials / M.A. Meyers // Wiley-Interscience, New York. – 1994.
32. Narayan, J. Direct evidence of presence of both interstitial and vacancy dislocation loops in plastically deformed and subsequently annealed magnesium oxide / J. Narayan, J. Washburn // Scripta Metallurgica. – 1972. – V. 6. – P. 263–265.
33. Ovid'ko, I.A. Dislocation emission from nanovoids in single-phase and composite nanocrystalline materials / I.A. Ovid'ko, A.G. Sheinerman // Reviews on Advanced Materials Science. – 2006. – V. 11. – P. 46–55.
34. Lubarda, V.A. Void growth by dislocation emission / V.A. Lubarda, M.S. Schneider, D.H. Kalantar, B.A. Remington, M.A. Meyers // Acta Materialia.– 2004. – V. 52(6). – P. 1397-1408.
35. Ahn, D.C. Void growth by dislocation-loop emission / D.C. Ahn, P. Sofronis // Journal of Applied Physics. – 2007. – V.101. – P. 063514.

36. Fischer, F. Deformation, stress state and thermodynamic force for a growing void in an elastic–plastic material / F. Fischer, T. Antretter // *International Journal of Plasticity*. – 2009. – V. 25 – P. 1819–1832.
37. Gama, A.B. Aluminum foam integral armor: a new dimension in armor design / B.A. Gama, T.A. Bogetti, B.K. Fink, C.-J. Yu, T.D. Claar, H.H. Eifert // *Composite Structures*. – 2001. – V. 52. –P. 381–395.
38. Ghazi, A. Multiscale computational modelling of closed cell metallic foams with detailed microstructural morphological control / A. Ghazi, P. Berke, K. Ehab Moustafa Kamel, B. Sonon, C. Tiago, T.J. Massart // *International Journal of Engineering Science* – 2019. – V. 143. – P. 92–114.
39. Kanaun, S. Conductive properties of foam materials with open or closed cells / S. Kanaun, S.B. Kochekserei // *International Journal of Engineering Science*. – 2012. – V.50. – P. 124-131.
40. Zhu, H. The effects of regularity on the geometrical properties of voronoi tessellations / H. Zhu, P. Zhang, D. Balint, S. Thorpe, J. Elliott, A. Windle, J. Lin // *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*. – 2014. – V. 406 – P. 42–58.
41. Chen, Y. Effects of cell size and cell wall thickness variations on the stiffness of closed-cell foams / Y. Chen, R. Das, M. Battley // *International Journal of Solids and Structures*. – 2015 – V. 52.–P. 150–164.
42. Redenbach, C. Laguerre tessellations for elastic stiffness simulations of closed foams with strongly varying cell sizes / C. Redenbach, I. Shklyar, H. Andr // *International Journal of Engineering Science*. – 2012 – V. 50 – P. 70–78.
43. Potirniche, G.P. Atomistic Modelling of Fatigue Crack Growth and Dislocation Structuring in FCC Crystals / G.P. Potirniche, M.F. Horstemeyer, P.M. Gullett, B. Jelinek // *Proceedings: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*. – 2006. – V.462. – P. 3707-3731.

44. Liu, B. Simulation of void growth and coalescence behavior with 3D crystal plasticity / B. Liu, X.M. Zhang, J.G. Tang, Y.X. Du // *Computational Materials Science*. – 2007. – V. 40. – P. 130–139.
45. Tszeng, T.C. Threshold condition of dislocation loop emission from microvoids / T.C. Tszeng // *Journal of Applied Physics*. – 2008. – V.103. – P. 053509.
46. Keralavarma, S.M. Void growth and coalescence in anisotropic plastic solids / S.M. Keralavarma, S. Hoelscher, A.A. Benzerga // *International Journal of Solids Structures*. – 2011. – V. 48. – P. 1696–1710.
47. Zhang, H. An effective semi-implicit integration scheme for rate dependent crystal plasticity using explicit finite element codes / H. Zhang, X. Dong, Q. Wang Z. Zeng // *Computational Materials Science*. – 2012. – V. 54. – P. 208–218.
48. Liu, B. The size effect on void growth in ductile materials / B. Liu, X. Qiu, Y. Huang, K.C. Hwang, M. Li, C. Liu // *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*. – 2003. – V. 51. – P. 1171–1187.
49. Huang, Y. A conventional theory of mechanism based strain gradient plasticity / Y. Huang, S. Qu, K.C. Hwang, M. Li, H. Gao // *International Journal of Plasticity*. – 2004. – V.21. – P.753–782.
50. Tvergaard, V. Nonlocal plasticity effects on interaction of different size voids / V. Tvergaard, C. Niordson // *International Journal of Plasticity*. – 2004. – V. 20. – P. 107–120.
51. Wen, J. The modified Gurson model accounting for the void size effect / J. Wen, Y. Huang, K.C. Hwang, C. Liu, M. Li // *International Journal of Plasticity*. – 2005. – V. 21. – P. 381–395.
52. Li, Z. RVE-based studies on the coupled effects of void size and void shape on yield behavior and void growth at micron scales / Z. Li, P. Steinmann // *International Journal of Plasticity*. – 2006. – V. 22. – P. 1195–1216.

53. Borg, U. Strain gradient crystal plasticity analysis of a single crystal containing a cylindrical void / U. Borg, J.W. Kysar // *International Journal of Solids Structures*.– 2007. – V. 44. – P. 6382–6397.
54. Borg, U. Size effect on void growth in single crystals with distributed voids / U. Borg, C.F. Niordson, J.W. Kysar // *International Journal of Plasticity*. – 2008. –V. 24. – P. 688–701.
55. Monchiet, V. A Gurson-type model accounting for void size effects / V. Monchiet, G. Bonnet // *International Journal of Solids Structures*.– 2013. – V. 50. – P. 320–327.
56. Huang, M. Discrete dislocation dynamics modeling of microvoid growth and its intrinsic mechanism in single crystals / M. Huang, Z. Li, C. Wang, // *Acta Materialia*.– 2007. – V. 55. – P. 1387–1396.
57. Hussein, M. Plasticity size effects in voided crystals / M. Hussein, U. Borg, C.F. Niordson, V.S. Deshpande // *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*. – 2008. – V. 56. – P. 114–131.
58. Segurado, J. An analysis of the size effect on void growth in single crystals using discrete dislocation dynamics / J. Segurado, J. Llorca // *Acta Materialia*. – 2009. – V. 57. – P. 1427–1436.
59. Segurado, J. Discrete dislocation dynamics analysis of the effect of lattice orientation on void growth in single crystals / J. Segurado, J. Llorca // *International Journal of Plasticity*. – 2010. – V. 26. – P. 806–819.
60. Liang, S. Discrete dislocation modeling on interaction between type-I blunt crack and cylindrical void in single crystals / S. Liang, M. Huang, Z. Li // *International Journal of Solids and Structures*. – 2015. – V. 56–57. – P. 209–219.
61. Zhang, Z.L. Complete Gurson model approach for ductile fracture / Z.L. Zhang, C. Thaulow, J. Ødegård // *Engineering Fracture Mechanics* – 2000. – V. 67.–P. 155–168.

62. Reddi, D. Ductile failure simulations using a multi-surface coupled damage plasticity model / D. Reddi, V.K. Areej, S.M. Keralavarma // *International Journal of Plasticity* – 2019. – V. 118 – P. 190–214.
63. Krasnikov, V.S. Plasticity driven growth of nanovoids and strength of aluminum at high rate tension: Molecular dynamics simulations and continuum modeling / V.S. Krasnikov, A.E. Mayer // *International Journal of Plasticity*. – 2015. – V. 74. – P. 75–91.
64. Mayer, A.E. Evolution of pore ensemble in solid and molten aluminum under dynamic tensile fracture: Molecular dynamics simulations and mechanical models / A.E. Mayer, P.N. Mayer // *International Journal of Mechanical Sciences*. – 2019. – V.157–158. – P. 816–832.
65. Farrissey, L. An atomistic study of void growth in single crystalline copper / L. Farrissey, M. Ludwig, P.E. McHugh, S. Schmauder // *Computational Materials Science*. – 2000. – V. 18. – P. 102–117.
66. Rudd, R.E. Void nucleation and associated plasticity in dynamic fracture of polycrystalline copper: an atomistic simulation / R.E. Rudd, J.F. Belak // *Computational Materials Science*. – 2002. – V. 24. – P. 148–153.
67. Dávila, L.P. Atomistic modeling of shock-induced void collapse in copper / L.P. Dávila, P. Erhart, E.M. Bringa, M.A. Meyers, V.A. Lubarda, M.S. Schneider, R. Becker, M. Kumar // *Applied Physics Letters*. – 2005. – V. 86. – P. 161902.
68. Song, Z.F. Crystal-orientation dependent evolution of edge dislocations from a void in single crystal Cu / Z.F. Song, W.J. Zhu, X.L. Deng, H.L. He // *Chinese Physics Letters*. – 2006. – V. 23. – P. 3041–3044.
69. Rudd, R.E. Void coalescence processes quantified through atomistic and multiscale simulation / R.E. Rudd, E.T. Seppälä, L.M. Dupuy, J. Belak // *Journal of Computer-Aided Materials Design*. – 2007. – V. 14. – P. 425–434.

70. Meyers, M.A. The role of dislocations in the growth of nanosized voids in ductile failure of metals / M.A. Meyers, S. Traiviratana, V.A. Lubarda, E.M. Bringa, D.J. Benson // *JOM*. – 2009. – V. 61. – P. 35–41.
71. Simar, A. Molecular dynamics simulations of dislocation interaction with voids in nickel / A. Simar, H.J.L. Voigt, B.D. Wirth // *Computational Materials Science*. – 2011. – V. 50. – P. 1811–1817.
72. Tang, Y.Z. Ductile tensile failure in metals through initiation and growth of nanosized voids / Y.Z. Tang, E.M. Bringa, M.A. Meyers // *Acta Materialia*. – 2012. – V. 60. – P. 4856–4865.
73. Wilkerson, J.W. A dynamic void growth model governed by dislocation kinetics / J.W. Wilkerson, K.T. Ramesh // *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*. – 2014. – V. 70(1). – P. 262–280.
74. Wilkerson, J.W. On the micromechanics of void dynamics at extreme rates / J.W. Wilkerson // *International Journal of Plasticity*. – 2017. – V. 95. – P. 21–42.
75. Cui, Y. Fundamental insights into the mass transfer via full dislocation loops due to alternative surface cuts / Y. Cui, Z. Chen, Y. Ju // *International Journal of Solids Structures*. – 2019. – V. 161. – P. 42–54.
76. Xiang, M. Shock responses of nanoporous aluminum by molecular dynamics simulations / M. Xiang, J. Cui, Y. Yang, Y. Liao, K. Wang, Y. Chen, J. Chen // *International Journal of Plasticity*. – 2017. – V. 97. – P. 24–45.
77. Brach, S. Void-shape effects on strength properties of nanoporous materials / S. Brach, S. Cherubini, D. Kondo, G. Vairo // *Mechanics Research Communications*. – 2017. – V. 86. – P. 11–17.
78. Zhu, W. Effect of pore shape and porosity on the elastic and fracture properties of nanoporous Mg and $M_{56}Al_{12}$ / W. Zhu, J. Du, G. Jiang // *Computational Materials Science*. – 2021. – V. 197. – P. 110666.

79. Verlet, L. Computer "experiments" on classical fluids. i. thermodynamical properties of Lennard-Jones molecules / L. Verlet // Physical Review. – 1967. – V. 159, No. 1. – P. 98–103.

80. Verlet, L. Computer "Experiments" on Classical Fluids. II. Equilibrium Correlation Functions / L. Verlet // – Physical Review. – 1968.– V. 165, No. 1. – P. 201–214.

81. Daw, M.S. Embedded-atom method: Derivation and application to impurities, surfaces, and other defects in metals / M.S. Daw, M.I. Baskes // Physical Review B. – 1984. – V. 29, No. 12. – P. 6443–6453.

82. LeCun, Y. Deep learning / Y. LeCun, Y. Bengio, G. Hinton // Nature. – 2015. – V. 521. – P. 436–444.

83. Frankel, A.L. Prediction of the evolution of the stress field of polycrystals undergoing elastic-plastic deformation with a hybrid neural network model / A.L. Frankel, K. Tachida, R.E. Jones // Machine Learning: Science and Technology. – 2020. – V. 1. – P. 035005.

84. Frankel, A.L. Predicting the mechanical response of oligocrystals with deep learning / A.L. Frankel, R.E. Jones, C. Alleman, J.A. Templeton // Computational Materials Science. –2019. – V. 169 – P. 109099.

85. Garland, A.P. Deep convolutional neural networks as a rapid screening tool for complex additively manufactured structures / A.P. Garland, B.C. White, B.H. Jared, M. Heiden, E. Donahue, B.L. Boyce // Additive Manufacturing. – 2020. – V.35. – P. 101217.

86. Herriott, C. Predicting microstructure-dependent mechanical properties in additively manufactured metals with machine-and deep-learning methods / C. Herriott, A.D. Spear // Computational Materials Science. –2020.– V. 175. – P. 109599.

87. Kantzos, C. Design of an interpretable convolutional neural network for stress concentration prediction in rough surfaces / C. Kantzos, J. Lao, A. Rollett // *Materials Characterization*. – 2019. – V. 158 – P. 109961.
88. Yan, W. Modeling process-structure-property relationships for additive manufacturing / W. Yan, S. Lin, O.L. Kafka, C. Yu, Z. Liu, Y. Lian, S. Wolff, J. Cao, G.J. Wagner, W.K. Liu // *Frontiers of Mechanical Engineering*. – 2018. – V. 13. – P. 482–492.
89. Mozaffar, M. Deep learning predicts path-dependent plasticity / M. Mozaffar, R. Bostanabad, W. Chen, K. Ehmann, J. Cao, M.A. Bessa // *Proceedings of the National Academy of Sciences*. – 2019.–V. 116. –P. 26414–26420.
90. Vlassis, N. Geometric deep learning for computational mechanics part I: Anisotropic hyperelasticity / N. Vlassis, R. Ma, W. Sun // *Computer Science*. – 2020. – V. 371. – P. 113299.
91. Altinkok, N. Mixture and pore volume fraction estimation in Al₂O₃/SiC ceramic cake using artificial neural networks / N. Altinkok, R. Koker // *Materials and Design*. – 2005. – V. 26. – P. 305–311.
92. Raj, E.R. Prediction of compressive properties of closed-cell aluminum foam using artificial neural network / E.R. Raj, B.S.S. Daniel // *Computational Materials Science*. – 2008. – V. 43. – P. 767–773.
93. Rajaka, D.K. On the influence of porosity and pore size on AlSi17 alloy foam using artificial neural network / D.K. Rajaka, L.A. Kumaraswamidhas, S. Das // *Ciência & Tecnologia dos Materiais*. – 2017. – V. 29. – P. 14–21.
94. Haghdadi, N. Artificial neural network modeling to predict the hot deformation behavior of an A356 aluminum alloy / N. Haghdadi, A. Zarei-Hanzaki, A.R. Khalesian, H.R. Abedi // *Materials & Design*. – 2013. – V. 49. – P. 386–391.
95. Mayer, A.E. Homogeneous nucleation of dislocations in copper: Theory and approximate description based on molecular dynamics and artificial

neural networks / A.E. Mayer, V.S. Krasnikov, V.V. Pogorelko // Computational Materials Science. – 2022. – V. 206. – P. 111266.

96. Gracheva, N.A. Application of neural networks for modeling shock-wave processes in aluminum / N.A. Gracheva, M.V. Lekanov, A.E. Mayer, E.V. Fomin // Mechanics of Solids. – 2021. – V. 56(3). – P. 326–342.

97. Cortes, C. Support-vector networks / C. Cortes, V. Vapnik // Machine Learning. – 1995. – V. 20. – P. 273–297.

98. Hassoun, M.H. Fundamentals of artificial neural networks / M.H. Hassoun // Computers & Mathematics with Applications. – 1996. – V. 31. – P. 131.

99. Breiman, L. Random forests / L. Breiman // Machine Learning. – 2001. – V. 45. – P. 5–32.

100. Ки, Д.У. Искусственные нейронные сети управления технологическими процессами / Д.У. Ки // Control Engineering. – 2016.

101. <https://neuralnet.info/>

102. Haykin, S. Neural Networks: A Comprehensive Foundation Subsequent Edition / S. Haykin // Prentice Hall. – 1999.

103. Tohme, T. A generalized Bayesian approach to model calibration / T. Tohme, K. Vanslette, K. Youcef-Toumi // Reliability Engineering & System Safety. – 2020. – V. 204 – P. 107141.

104. Kuksin, A. Dynamic fracture kinetics, influence of temperature and microstructure in the atomistic model of aluminum / A. Kuksin, G. Norman, V. Stegailov, A. Yanilkin, P. Zhilyaev // International Journal of Fracture. – 2010. – V. 162(1–2). – P. 127–136.

105. Kraichikov, S.S. Molecular-Dynamics Investigation into Influence of NanoParticles in Spall / S.S. Kraichikov, V.V. Dremov, Ph.A. Sapozhnikov // AIP Conference Proceedings. – 2006. – V. 845(1). – P. 399–402.

106. Huang, L. Shock-induced consolidation and spallation of Cu nanopowders / L. Huang, W.Z. Han, Q. An, W.A. Goddard III, S.N. Luo // *Journal of Applied Physics*. – 2012. – V. 111(1). – P. 113508.
107. Dongare, A.M. Atomic scale studies of spall behavior in nanocrystalline Cu / A.M. Dongare, A.M. Rajendran, B. LaMattina, M.A. Zikry, D.W. Brenner // *Journal of Applied Physics*. – 2010. – V. 108(11). – P. 113518.
108. Liao, Y. Molecular dynamics studies of the roles of microstructure and thermal effects in spallation of aluminum / Y. Liao, M. Xiang, X. Zeng, J. Chen // *Mechanics of Materials*. – 2015. – V. 84. – P. 12–27.
109. Mackenchery, K. Dislocation evolution and peak spall strengths in single crystal and nanocrystalline Cu / K. Mackenchery, R.R. Valisetty, R.R. Namburu, A. Stukowski, A.M. Rajendran, A.M. Dongare // *Journal of Applied Physics*. – 2016. – V. 119(4). – P. 044301.
110. Luo, S.N. Anisotropic shock response of columnar nanocrystalline Cu / S.N. Luo, T.C. Germann, T.G. Desai, D.L. Tonks, Q. An // *Journal of Applied Physics*. – 2010. – V. 107(12). – P. 123507.
111. Yuan, F. Twin boundary spacing effects on shock response and spall behaviors of hierarchically nanotwinned fcc metals / F. Yuan, L. Chen, P. Jiang, X. Wu // *Journal of Applied Physics*. – 2014. – V. 115(6). – P. 063509.
112. Apostol, F. Interatomic potential for the Al-Cu system / F. Apostol, Y. Mishin // *Physical Review B*. – 2011. – V. 83. – P. 054116.
113. Plimpton, S.J., Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics / S.J. Plimpton // *Journal of Computational Physics*. – 1995. – V. 117. – P. 119.
114. Hoover, W.G. Canonical dynamics: Equilibrium phase-space distributions / W.G. Hoover // *Physical Review A*. – 1985. – V. 31(3). – P. 1695–1697.
115. Mayer, A.E. Plastic deformation at dynamic compaction of aluminum nanopowder: molecular dynamics simulations and mechanical model / A.E. Mayer,

A.A. Ebel, M.K.A. Al-Sandoqachi // International Journal of Plasticity. – 2020 – V. 124.– P. 22–41.

116. Stukowski, A. Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO / A. Stukowski // Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering. – 2010. – V. 18 – P. 015012. (<http://www.ovito.org>)

117. Stukowski, A. Computational analysis methods in atomistic modeling of crystals / A. Stukowski // JOM. – 2014. – V. 66(3). – P. 399–407.

118. Smirnova, D. E. New interatomic potential for simulation of pure magnesium and magnesium hydrides / D. E. Smirnova, S. V. Starikov, A.M. Vlasova // Computational Materials Science.–2018. – V. 154. – P. 295–302.

119. Honeycutt, J.D. Molecular dynamics study of melting and freezing of small Lennard-Jones clusters / J.D. Honeycutt, H.C. Andersen // The Journal of Physical Chemistry. – 1987. – V. 91. – P. 4950–4963.

120. Stukowski, A. Structure identification methods for atomistic simulations of crystalline materials / A. Stukowski // Materials Science and Engineering – 2012. – V. 20. – P. 045021.

121. Mayer, A.E. Strain rate dependence of spall strength for solid and molten lead and tin / A.E. Mayer, P.N. Mayer // International Journal of Fracture. – 2020. – V. 222. – P. 171–195.

122. Mayer, A. E. Strength of solid and molten aluminum under dynamic tension / A. E. Mayer, P. N. Mayer // JETP Letters. –2015. – V. 102. – P. 80–84.

123. Goodfellow, I. Deep Learning / Goodfellow, I., Bengio, Y., Courville, A. // MIT Press. –2016. (www.deeplearningbook.org)

124. Nielsen, M. Neural Networks and Deep Learning / M. Nielsen // – 2019. (<http://neuralnetworksanddeeplearning.com>)

125. Mayer, A.E. Dislocation nucleation in Al single crystal at shear parallel to (111) plane: molecular dynamics simulations and nucleation theory with

artificial neural networks / A.E. Mayer, V.S. Krasnikov, V.V. Pogorelko // International Journal of Plasticity. – 2021. – V. 139. – P. 102953.

126. Nguyen, T. A dislocation-based crystal plasticity framework for dynamic ductile failure of single crystals / T. Nguyen, D. Luscher, J. Wilkerson // Journal of the Mechanics and Physics of Solids. – 2017. – V. 108. – P. 1–29.

127. Latypov, F.T. Dynamics compaction of aluminum with nanopores of varied shape: MD simulations and machine-learning-based approximation of deformation behavior / F.T. Latypov, E.V. Fomin, V.S. Krasnikov, A.E. Mayer // International Journal of Plasticity. – 2022 – V. 156 – P. 103363.

128. Mase G.E. Theory and Problems of Continuum Mechanics / Mase G.E. // McGraw-Hill – New York. – 1970.

129. Khan, A.S. Strain rate effect of high purity aluminum single crystals: experiments and simulations / A.S. Khan, J. Liu, J.W. Yoon, R. Nambori // International Journal of Plasticity. – 2015. – V. 67. – P. 39–52.

130. Khan, A.S. A deformation mechanism based crystal plasticity model of ultrafine-grained/nanocrystalline FCC polycrystals / A.S. Khan, J. Liu // International Journal of Plasticity. – 2016. – V.86. – P. 56–69.

131. Popova, T.V. Evolution of shock compression pulses in polymethylmethacrylate and aluminum / T.V. Popova, A.E. Mayer, K.V. Khishchenko // Journal of Applied Physics. – 2018. – V.123 (23). – P. 235902.

132. Selyutina, N. The definition of characteristic times of plastic relaxation by dislocation slip and grain boundary sliding in copper and nickel / N. Selyutina, E.N. Borodin, Y. Petrov, A.E. Mayer // International Journal of Plasticity. – 2016 – V. 82 – P. 97–111

133. Latypov F.T. Dynamics of growth and collapse of nanopores in copper / F.T. Latypov, A.E. Mayer, V.S. Krasnikov // International Journal of Solids Structures. – 2020. – V. 202. – P. 418–433.

134. Mayer, A.E. Molecular dynamics investigation of dislocation slip in pure metals and alloys / A.E. Mayer, V.S. Krasnikov // Proceedings of the Second

International Conference on Theoretical, Applied and Experimental Mechanics. ICTAEM 2019. Structural Integrity. – 2019. – V.8. – P. 59–64.

135. Czarnota, C. The structure of steady shock waves in porous metals / C. Czarnota, A. Molinari, S. Mercier // Journal of the Mechanics and Physics of Solids. – 2017. – V. 107. – P. 204–228.

136. Mayer, A.E. Plastic deformation at dynamic compaction of aluminum nanopowder: molecular dynamics simulations and mechanical model / A.E. Mayer, A.A. Ebel, M.K.A. Al-Sandoqachi // International Journal of Plasticity. – 2020. – V.124. – P.22–41.

137. Nguyen T. Dynamic crystal plasticity modeling of single crystal tantalum and validation using Taylor cylinder impact tests / T. Nguyen, S.J. Fensin, D.J. Luscher // International Journal of Plasticity. –2021. – V.139. – P.102940.

138. Mayer, A.E. Limit of ultra-high strain rates in plastic response of metals / A.E. Mayer, V.S. Krasnikov, V.V. Pogorelko// Proceedings of the First International Conference on Theoretical, Applied and Experimental Mechanics. ICTAEM 2018. Structural Integrity. – 2019. – V. 5. – P. 273–278.

139. Kuropatenko V.F. New models of continuum mechanics. // Journal of Engineering Physics and Thermophysics. – 2011. – V. 84. – P. 77–99.

140. Khishchenko, K.V. High- and low-entropy layers in solids behind shock and ramp compression waves /K.V. Khishchenko, A.E. Mayer // International Journal of Mechanical Sciences. – 2021. – V. 189. – P. 105971.

141. Kelchner, C.L. Dislocation nucleation and defect structure during surface indentation / C.L. Kelchner, S.J. Plimpton, J.C. Hamilton // Physical Review B. –1998. – V. 58. – P. 11085.