

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

Родионов Егор Сергеевич

**ПОСТРОЕНИЕ И ОПТИМИЗАЦИЯ МОДЕЛИ
ДИСЛОКАЦИОННОЙ ПЛАСТИЧНОСТИ МЕТАЛЛОВ НА ОСНОВЕ
ЭКСПЕРИМЕНТА, SPH 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, 2023

Оглавление

Введение.....	5
Глава 1. Тесты Тейлора, динамическая пластичность, численный метод SPH и машинное обучение	14
1.1. Экспериментальные исследования динамической деформации металлов	14
1.2. Модели пластичности.....	21
1.3. Метод гидродинамики сглаженных частиц (SPH)	25
1.4. Параметризация численных моделей.....	29
1.5. Искусственные нейронные сети.....	32
Выводы по первой главе.....	35
Глава 2. Трехмерная теоретическая модель динамической деформации металлов на основе дислокационной пластичности и SPH	37
2.1. Модель дислокационной пластичности и ее численная реализация	37
2.2. Измельчение зерна и ослабленные участки (порообразные структуры)	43
2.3. Уравнение состояния в виде ИНС.....	46
2.4. Численная схема SPH	50
2.5. Тестирование трехмерной модели	56
2.5.1. Упругое и пластическое соударение шаров.....	56
2.5.2. Простое упругое растяжение	58
Выводы по второй главе.....	61
Глава 3. Тесты Тейлора с классическими и профилированными цилиндрами	63
3.1. Экспериментальная установка.....	63

3.1.1. Образцы для проведения динамических испытаний.....	65
3.2. Результаты динамических испытаний	66
3.2.1. Ударники из твердой меди.....	66
3.2.2. Медные отожженные ударники.....	68
3.2.3. Латунные ударники.....	70
3.2.4. Дюралюминиевые ударники	73
3.3. Микроструктурный анализ	76
3.3.1. Металлография холоднокатанных медных образцов.....	76
3.3.2. Металлография отожженных медных образцов	82
3.3.3. Металлография латунных образцов.....	84
3.4 Аналитическая оценка динамического предела текучести для профилированных образцов.....	87
Выводы по третьей главе.....	97
Глава 4. Параметризация теоретической модели методами машинного обучения.....	99
4.1. Параметризация для случая медных образцов.....	99
4.1.1. Обучение ИНС-эмулятора трехмерной модели.....	100
4.1.2. Оптимизация параметров модели статистическим методом Байеса для твердой меди	104
4.2. Результаты теоретической модели для меди.....	117
4.2.1. Классический 8-мм цилиндр.....	117
4.2.2. Уменьшенные цилиндры.....	120
4.2.3. Усеченные конусы	124
4.2.4. Скорость деформации при ударе.....	126

4.2.5. Оценка измельчения зерен и ослабленных участков (порообразных структур)	127
4.2.6. Влияние трения на финальную форму образца	131
4.2.7. Сравнение с экспериментами по метанию пластин	133
4.2.8. Расчеты для отожженных медных образцов	135
4.3. Параметризация для случая латунных образцов	138
4.3.1. ИНС-эмулятор для латунных образцов	139
4.3.2. Оптимизация параметров модели статистическим методом Байеса для латуни	142
4.3.3. Результаты теоретической модели для профилированных латунных цилиндров	145
4.3.4. Результаты теоретической модели для классических латунных цилиндров	147
Выводы по четвертой главе	149
Заключение	152
Список публикаций автора по теме диссертации.....	154
Список литературы	156

Введение

Актуальность темы. Исследование динамической пластичности и прочности металлов представляет собой актуальную задачу, поскольку динамическое нагружение часто имеет место в различных гражданских и оборонных приложениях. Для прогнозирования поведения материалов в таких условиях насущной задачей является развитие теоретических моделей динамической деформации и оптимизация их параметров (обучение) под конкретный материал с учетом его исходного микроструктурного состояния, используя данные экспериментальных исследований.

Существующие экспериментальные методы динамических испытаний охватывают широкий диапазон скоростей деформации – до 10^9 с⁻¹. Одним из широко используемых методов динамических испытаний являются тесты Тейлора [1-4] по высокоскоростному соударению цилиндров из исследуемых материалов с жесткой стенкой (наковальней) при характерной скорости в несколько сотен метров в секунду. Испытания на удар по Тейлору сочетают большие неравномерные деформации и большие скорости деформации в диапазоне 10^4 – 10^5 с⁻¹. Тесты Тейлора используются в настоящее время, как для определения динамических характеристик материалов, включая чистые металлы [5,6], обычные и высокоэнтропийные сплавы [7], так и для оптимизации параметров модели материала [8-11]. Были предложены и использованы различные модификации классической схемы эксперимента, такие как симметричный (стержень на стержень) тест Тейлора [4]. Недостаток этой методики с точки зрения интерпретации результатов связан с крайне неравномерной деформацией материала по образцу.

Параметризация теоретических моделей материалов путем сравнения с данными экспериментов или атомистического моделирования является насущной проблемой, и разработка подходов к машинному обучению очень актуальна в этой области. Мощным инструментом является статистический метод Байеса [12], заключающийся в случайном переборе наборов

параметров и оценке квазивероятности каждого набора по соответствию между предсказаниями модели и обучающими данными. Уолтерс и др. [13] успешно использовали эксперименты по соударению металлических пластин и метод Байеса для калибровки модели Джонсона-Кука; быстрый эмулятор (модель гауссовой регрессии) был обучен предсказывать результаты численного моделирования, чтобы заменить полную численную модель в байесовском алгоритме и ускорить процесс оптимизации. Следует отметить, что модель Джонсона-Кука редко используется для моделирования ударно-волновых задач, но байесовская оптимизация позволила авторам получить приемлемые соответствия с экспериментальными профилями скорости свободной поверхности. Для калибровки модели использовались только четыре точки на фронте ударной волны для каждого экспериментального выстрела, при этом упругопластическая волна разгрузки не рассматривалась. Нгуен и др. [14] применили аналогичный подход для калибровки модели дислокационной пластичности, а затем использовали калиброванную модель для численного исследования анизотропии деформации в тестах Тейлора с монокристаллами тантала. Сю и др. [15] развили предыдущий подход к калибровке [13] путем включения данных четырех типов испытаний: квазистатическое сжатие, стержень Гопкинсона, цилиндры Тейлора и эксперименты по соударению пластин. В этом наборе цилиндры Тейлора обеспечивают большие истинные деформации (до 3), но ограниченные скорости деформации (10^4 с^{-1}), в то время как эксперименты по соударению пластин обеспечивают скорости деформации на два порядка выше (10^6 с^{-1}), но ограниченные деформации (примерно до 0,1). В этом смысле значительный интерес представляет увеличение скорости деформации при сохранении больших деформаций за счет профилирования головной части цилиндра в тестах Тейлора. Ривера и др. [10] использовали классические тесты Тейлора и алгоритм Байеса для калибровки модели прочности Престона-Тонкса-Уоллеса [16] для тантала. Они построили эмулятор конечно-элементного моделирования тестов Тейлора с помощью

гауссовского процесса и включили его в алгоритм байесовской калибровки. Были рассмотрены только три экспериментальных профиля со слегка различающимися скоростями, и только четыре числа (конечные положения двух выбранных материальных точек) для каждого профиля сравнивались с суррогатной моделью.

Настоящая работа посвящена разработке трехмерной теоретической модели дислокационной пластичности и методов машинного обучения для определения параметров модели по наборам экспериментальных данных тестов Тэйлора для различных форм образца и различных скоростей соударения.

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

Задачи:

1. Разработка трехмерной теоретической модели деформации металлов на основе численного метода сглаженных частиц (SPH – smoothed particle hydrodynamics) и дислокационно-кинетического подхода при описании пластичности. Разработка параллельной версии кода и создание с ее помощью базы данных результатов расчетов при различных параметрах модели, геометрии образца и скорости соударения.

2. Обучение искусственной нейронной сети (ИНС) по базе данных результатов расчетов в качестве быстрого эмулятора кода SPH.

3. Проведение экспериментальных исследований по высокоскоростному соударению цилиндрических и профилированных ударников из меди и латуни, определение их размеров после деформации и исследование их микроструктуры. Создание базы данных для оптимизации модели.

4. Оптимизация параметров модели пластичности по экспериментальным данным с помощью статистического метода Байеса с

использованием ИНС в качестве эмулятора SPH. Сравнение результатов расчетов SPH с оптимизированными параметрами с экспериментальными данными.

5. Разработка метода оценки динамического предела текучести по тестам Тейлора с уменьшенными цилиндрами в головной части.

Методы исследования. В работе применено сочетание теоретических и экспериментальных методов для исследования деформации металлов.

Трехмерная численная модель основана на методе гидродинамики сглаженных частиц (SPH), где в качестве сглаживающего ядра применен кубический сплайн. В код SPH впервые была встроена модель дислокационной пластичности, что позволило учитывать кинетику дислокаций: их скольжение, закрепление (иммобилизацию), аннигиляцию и размножение. Модель дислокационной пластичности дополнена подмоделью измельчения зерен и образования ослабленных зон материала (зародышей пор) за счет высвобождающейся энергии при аннигиляции дислокаций. Распараллеливание кода SPH для создания базы данных расчетов с учетом геометрии образца, скорости соударения и параметров модели выполнено с помощью OpenMP. Обученная по базе данных расчетов SPH искусственная нейронная сеть (ИНС) позволяет эмулировать работу кода SPH. ИНС существенно ускоряет подбор параметров модели пластичности статистическим методом Байеса, который предполагает оценку вероятности случайных наборов параметров по степени соответствия обучающим данным и выбор наиболее вероятного набора.

С помощью экспериментов по разгону и соударению ударников в ударной трубе были получены деформированные образцы, для каждого образца измерялся диаметр и длина до и после деформации, а также скорость соударения с наковальной времяпролетным методом. Проводилась оптическая микроскопия шлифов образцов. По результатам экспериментов составлена база обучающих данных для оптимизации параметров модели пластичности.

Научная новизна состоит в следующем:

Впервые предложена реализация численного метода гидродинамики сглаженных частиц (SPH), дополненная моделью дислокационной пластичности с учетом измельчения зеренной структуры и образования пор как следствия аннигиляции дислокаций (модель каскада энергии).

Впервые предложено эмулировать работу кода SPH с помощью искусственной нейронной сети с целью существенного ускорения параметризации модели дислокационной пластичности.

Впервые в тестах Тейлора предложено концентрировать энергию удара в головной части образца за счет ее профилирования (модификация формы ударников), что позволяет в условиях ограниченных скоростей соударения около 120 м/с получать пластически деформированные образцы со скоростями деформации до 10^5 с^{-1} и величиной деформации до единиц. При таких условиях деформации в головной части медных образцов развиваются трещины и порообразные структуры, а в случае латунных образцов достигается разрушение головной части на множественные мелкие фрагменты. Использование различных форм ударников позволяет более точно параметризовать модель пластичности и кинетики дислокаций.

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

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

Практическая значимость Разработанный теоретический подход на основе машинного обучения к описанию деформации в металлах можно применять к различным материалам и сплавам для параметризации моделей

материалов. Такой подход позволяет добиться хорошего соответствия теории эксперименту и, как следствие, прогнозировать поведение материала при динамической деформации при решении инженерных задач.

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

Личный вклад автора. В ходе выполнения научно-квалификационной работы автор принимал активное участие в формулировке целей и задач исследования, проводил разработку теоретической модели и ее численную реализацию, численное моделирование, экспериментальные исследования по соударению образцов и анализу микроструктуры, а также обработку и анализ полученных данных. Экспериментальные исследования и микроструктурный анализ проводились совместно с Лупановым В.Г. Блок работ по построению теоретической модели, реализации и отладке численного кода SPH, дополненного моделью кинетики дислокаций выполнен совместно с Майером А.Е., Майер П.Н. и Грачёвой Н.А. Блок работ по обучению искусственной нейронной сети для эмулирования работы SPH и параметризации модели пластичности с помощью статистического метода Байеса проводился совместно с Погорелко В.В. и Майером А.Е. Развитие

приближенного метода оценки предела текучести, скорости деформации и времени остановки образца проводилось совместно с Майером А.Е. Автор участвовал в подготовке результатов исследования к публикации и представлял их на научных конференциях. По всем блокам работ, представленным в диссертации, вклад автора был определяющим или существенным в достаточной степени, чтобы выносить их на защиту.

Положения и результаты, выносимые на защиту.

1. Трехмерная теоретической модель упругопластической деформации металлов при высокоскоростном соударении на основе метода сглаженных частиц (SPH) и подхода дислокационной пластичности, включая подмодель для оценки измельчения зерен и образования порообразных структур на основе представлений о каскаде энергии между уровнями дефектной структуры материала. Разработанная модель качественно и количественно правильно описывает экспериментальные данные, включая изменение формы и микроструктуры динамически деформированных образцов.

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

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

4. Теоретический подход на основе машинного обучения для оптимизации параметров (обучения) модели дислокационной пластичности под конкретный материал по наборам экспериментальных данных тестов

Тейлора для классических и профилированных образцов. Оптимизация параметров проводится статистическим методом Байеса с использованием ИНС эмулятора трехмерной численной модели SPH. Использование обучающих экспериментальные данные для разных форм образцов и скоростей соударения дает более четкую локализацию области оптимальных параметров модели. Развитый подход к оптимизации параметров модели позволяет правильно оценивать состояние образцов до деформации, в частности, для холоднокатанной меди начальная плотность дислокаций определена как $0.8 \cdot 10^{14} \text{ м}^{-2}$, что соответствует оценкам из микроструктурных наблюдений и литературным данным для деформированной меди.

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

Апробация результатов работы.

Результаты исследований представлены на конференциях:

– XXXVI International Conference on Interaction of Intense Energy Fluxes with Matter (ELBRUS 2021). Россия, п. Терскол, 2021. Стендовый доклад.

– XLVII Международная молодёжная научная конференция «Гагаринские чтения». Россия, г. Москва, 2021. Устный доклад.

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

– Международная конференция XV Забабахинские научные чтения. Россия, г. Снежинск, 2021. Устный доклад.

– 64-ая Всероссийская научная конференция МФТИ. Россия, г. Москва, 2021. Устный доклад.

– «XXXVII Фортовская международная конференция по уравнениям состояния вещества (ELBRUS 2022)». Россия, п. Терскол, 2022. Стендовый доклад.

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

– Международная конференция XVI Забабахинские научные чтения. Россия, г. Снежинск, 2023. Устный доклад.

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

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

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

Глава 1. Тесты Тейлора, динамическая пластичность, численный метод SPH и машинное обучение

Первая глава посвящена обзору литературы по основным направлениям теоретических и экспериментальных работ в области диссертационного исследования, включая динамические испытания материалов, методы моделирования и методы машинного обучения.

1.1. Экспериментальные исследования динамической деформации металлов

Для различных промышленных, инженерных и оборонных приложений необходимо знание динамической прочности материалов и ее связи с механизмами пластичности, определяющими механическую реакцию материалов. Хорошо известно, что металлы могут выдерживать кратковременное действие напряжений, намного превышающих их статический предел текучести, не подвергаясь пластической деформации. Существующие экспериментальные методы динамических испытаний охватывают широкий диапазон скоростей деформации – до 10^9 с^{-1} , что уже достижимо при прямом моделировании методом молекулярной динамики (МД), тогда как большинство практических задач соответствует много более низким скоростям деформации. Генерация плоских ударных волн в металлах обеспечивает хорошо контролируемые условия динамического нагружения для экспериментального измерения динамической текучести и откольной прочности [17,18] путем интерпретации временного профиля скорости свободной поверхности, зарегистрированной с помощью лазерной интерферометрии [19]. Различные методы генерации плоских ударных волн позволяют охватить широкий диапазон скоростей деформации, так эксперименты по соударению пластин [20-23] обеспечивают ударно-волновое нагружение со скоростями деформации от 10^4 с^{-1} до 10^6 с^{-1} в

зависимости от толщины образца. Скорости деформации около 10^6 с^{-1} и выше могут быть достигнуты в ударных волнах, генерируемых сильноточным электронным облучением [24,25] или мощным ионным облучением [26,27]. Интенсивные лазерные импульсы короткой [28,29] и ультракороткой [30-32] длительности могут генерировать в тонких образцах крутые фронты ударных волн со скоростями деформации до $10^7\text{--}10^9 \text{ с}^{-1}$. Несмотря на достижимые высокие скорости деформации, плоские ударные волны вызывают относительно небольшие деформации – обычно порядка 0,1.

Один из самых простых, и в то же время информативных методов динамических испытаний – тест Тейлора [1-3], он состоит в ускорении цилиндрического образца исследуемого металла газовой пушкой с последующим соударением с более твердой преградой (наковальней) обычно со скоростями удара в несколько сотен метров в секунду. Такое столкновение вызывает одновременно большие деформации, превышающие 1, и высокие скорости деформации до $10^4\text{--}10^5 \text{ с}^{-1}$, особенно вблизи ударной поверхности образца. Исходной целью разработки этого метода было определение динамического предела текучести при ударном сжатии металлических образцов.

Рассмотрим более подробно предложенный в [1] метод оценки динамического предела текучести. Для упрощения теории предполагается, что напряжение в той части снаряда, которая поддается деформации, является постоянным и равным пределу текучести Y . Также для упрощения картины пренебрегается радиальной инерцией, что позволяет рассматривать напряжение постоянным в любом поперечном сечении. Предполагается, что материал, только что прошедший через границу зоны пластического течения, останавливается почти сразу; для этого материал должен двигаться очень быстро. Схематическое изображение модели, в которой задняя часть всё ещё движется, представлена на рис. 1.1. Если A_0 - поперечное сечение образца до

пластического сжатия, а A – поперечное сечение после деформации, уравнение неразрывности принимает вид:

$$A_0(u + v) = Av, \quad (1.1)$$

и если напряжение одинаково во всей деформируемой части материала, закон сохранения импульса примет вид:

$$\rho A_0(u + v)u = Y(A - A_0). \quad (1.2)$$

Продольная деформация в каждой точке материала может быть определена как:

$$e = 1 - \frac{A_0}{A}, \quad (1.3)$$

где ρ - плотность материала, Y – динамический предел текучести материала, h – расстояние от границы пластически деформированной части образца до поверхности соударения, x – длина участка, который не был пластически сжат, v – скорость движения фронта пластической деформации и u – скорость тыльной части образца.

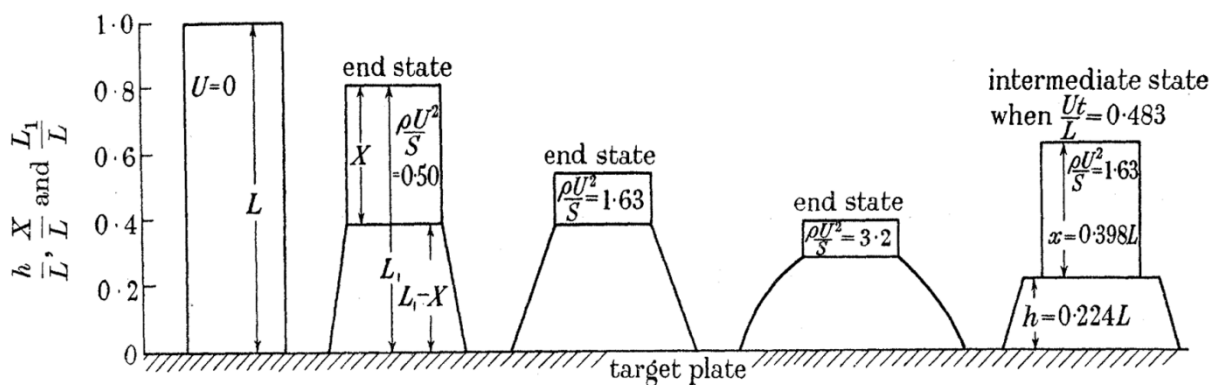


Рис. 1.1. Классическая модель оценки динамического предела текучести по тестам Тейлора [1].

Апробация данной теории проводилась на образцах из парафина. Изначально снаряды являлись прозрачными, но после проведения

эксперимента в деформированной области снаряды утрачивали свою прозрачность, это и позволило автору определить границу интенсивного нагружения материала, т.е. область больших напряжений.

В настоящее время данный метод пользуется популярностью для исследования микротвердости и микроструктуры деформированных образцов [6], а также применяется и для верификации и параметризации численных моделей [8-10]. Пример сечения классических медных цилиндров после испытания на удар по Тейлору показан на рис. 1.2. [33].



Рис. 1.2. Сечения медных образцов после удара с различными начальными скоростями: а — 162 м/с; б — 225 м/с; в — 316 м/с; г — 416 м/с [33].

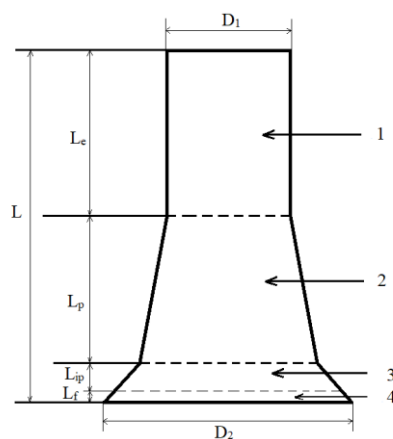


Рис. 1.3. Схема деформации образца после удара о жесткую стенку [6].

Схематическое изображение образца представлено на рис. 1.3. [6]: зона 1 соответствует почти упругой деформации, зона 2 — пластической деформации, зона 3 — интенсивной пластической деформации, зона 4 — разрушению материала. Зная геометрические размеры каждой из зон и

область перехода пластически деформированного образца в недеформированную часть авторы могут рассчитать динамический предел текучести материала.

Дальнейшее развитие методики привело к появлению различных модификаций теста Тейлора. Одной из модификаций является симметричный тест Тейлора [4], суть которого заключается в том, что роль наковальни выполняет образец, материал и геометрические параметры которого такие же, как и у ударника. В частности это позволяет при существенно меньшей скорости соударения, по сравнению с классическим тестом Тейлора реализовать осевое повреждение ударника за счет уменьшения роли трения на ударной поверхности. Схема эксперимента показана на рис. 1.4.

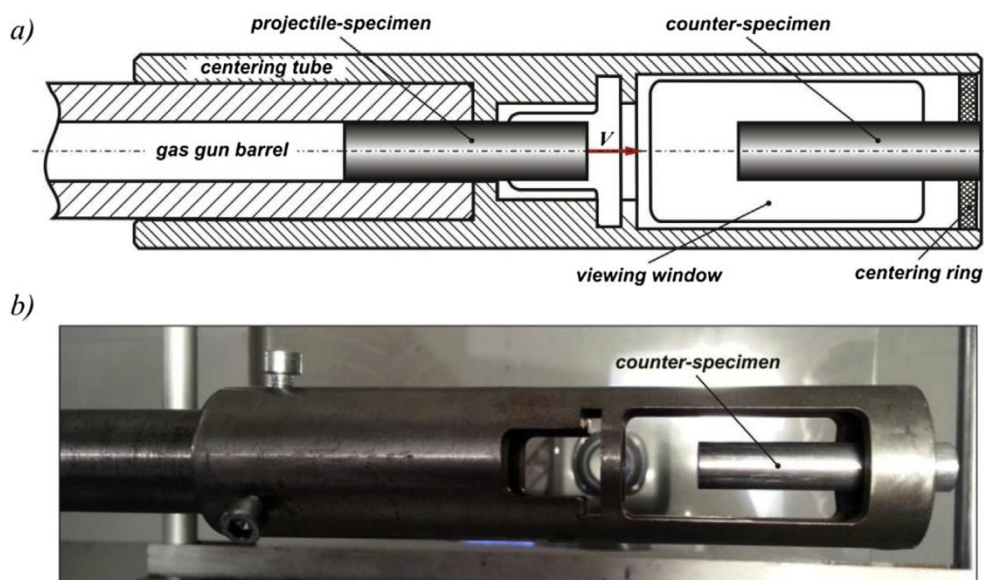


Рис. 1.4. Центрирующая трубка для испытания на симметричный удар: а) схема; б) фотография установки [4].

Существует также обратный тест Тейлора [34], который подразумевает разгон наковальни и соударение с неподвижным ударником. В работе авторы указывают на то, что такая конфигурация позволяет им проще вывести теоретическую модель, используя альтернативный выбор системы отсчета, которая соответствует экспериментальным условиям. Схема экспериментальной установки показана на рис. 1.5.

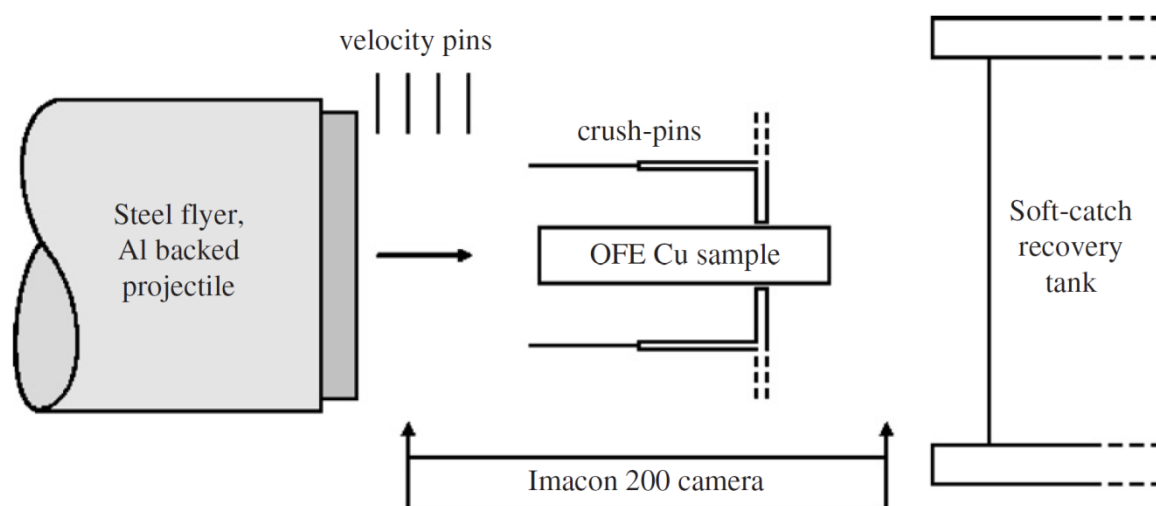


Рис. 1.5. Схема установки для обратного эксперимента Тейлора с ударом наковальни по стержню [34].

В работе [35] авторы исследуют режимы деформации и разрушения стальных снарядов при ударе, используя классический тест Тейлора. Экспериментальное исследование деформации популярных в последние десятилетия высокоэнтропийных сплавов, изменение их микроструктуры и параметризация численной модели, описывающей эксперименты представлено в работе [7]. Авторы делают вывод, что эксперимент на удар по Тейлору вместе с последующей термообработкой обеспечивает новый подход к изготовлению объемных градиентных структур.

В работе [36] исследуют упруго-пластическую деформацию микроразмерных частиц меди, ударяющихся о медную подложку, в качестве инструмента использовалась континуальная модель и термомеханический анализ методом конечных элементов. Целью работы было исследование пластичности, зависящей от скорости деформации, в широком диапазоне скоростей деформации. Авторы предлагают совместное использование модели Джонсона – Кука [37] и Каупера – Саймондса [38] для описания низких и высоких скоростей деформаций.

В качестве продолжения идеи предыдущей работы, авторы в работе [39] применили метод формирования импульса к ударным испытаниям с

помощью теста Тейлора для расширения возможности измерения кривой напряжение – деформации для высоких скоростей деформации. Авторы используют профилированные цилиндры, что помогает им увеличить время нарастания импульса.

При испытаниях Тейлора возникают сложные напряженно-деформированные состояния образца, что затрудняет аналитический анализ деформационного поведения. Классический метод оценки [1] позволяет определить только усредненное напряжение течения, которое принимается равным пределу текучести. Такой подход обеспечивает хорошие результаты для материалов с диаграммой напряжения – деформации, близкой к идеально пластической. С другой стороны, современное развитие численных методов и методов машинного обучения позволяет преодолеть эти трудности и использовать тест Тейлора как эффективный метод накопления обучающих данных для параметризации и верификации теоретических моделей динамической деформации материалов.

Существуют также и другие методики динамических испытаний материалов [40-43]. К ним можно отнести динамическую деформацию с помощью составных стержней Гопкинсона-Кольского [43,44], эксперимент по сдвигу под давлением [45], тест Тейлора [1] и исследование поведения материала в кумулятивной струе [46-49]. В работе [50] авторы предлагают экспериментальную методику оценки предельной динамической пластичности материалов в условиях кумулятивного струйного течения без использования взрывчатых веществ. Для проведения микрокумулятивных испытаний использовали миниатюрные цилиндрические образцы с коническими ямками. Динамическое нагружение образцов осуществлялось ударником, разгоняемым газовой пушкой до скоростей в диапазоне 600–800 м/с. Авторы определили оптимальную геометрию образцов и режимы испытаний, в том числе фокусное расстояние при микрокумулятивных испытаниях. Скорость течения микрокумулятивной струи оказалась равной ее теоретическому значению, рассчитанному в рамках гидродинамической

теории Лаврентьева [51]. На примере меди высокой чистоты продемонстрирована возможность исследования связи между исходной микроструктурой образцов и предельной величиной динамической пластичности при кумулятивном струйном течении. Показано, что глубина проникновения кумулятивной микроструи в стальную преграду существенно зависит от параметров микроструктуры меди.

На основании проведенного обзора можно заключить, что тесты Тейлора являются простым и информативным методом динамических испытаний, не требующим регистрации параметров во время соударения, что обуславливает их выбор в данном диссертационном исследовании.

1.2. Модели пластичности

При описании динамической деформации важен учет конечной скорости пластической релаксации напряжений [52], что связано с инертностью эволюции дефектов в материале. Одним из способов рассмотрения пластического течения при высокоскоростной деформации являются вязкопластические модели, связывающие предел текучести материала со скоростью деформации, пластической деформацией, температурой и т.д. на основе физически обоснованных аналитических выражений. В литературе разработаны и используются различные модели пластичности для прогнозирования поведения металлов при динамическом нагружении, такие как классические модели Джонсона-Кука [53,54], Зерилли-Армстронга [55,56] и Престона-Тонкса-Уоллеса [16]. Эти модели удобны для инженерных приложений, но не могут явно предсказать зависимость от исходной микроструктуры, изменение микроструктуры и детали неравновесной релаксации, такие как пики напряжений в упругих предвестниках ударных волн [57].

Физически обоснованные дислокационные модели пластичности с явным описанием дислокационного ансамбля точнее воспроизводят структуру упругопластических ударных волн в металлах [58-63]. В таких

моделях вводятся дополнительные внутренние переменные, описывающие состояние дислокационной подсистемы материала, например плотности и скорости движения дислокаций, распределенных по конкретным системам скольжения.

В работе Остина и Макдауэла [58] авторы разработали физически обоснованную дислокационную модель динамической пластичности, которая позволяет решать задачи скольжения в поликристаллических металлах и сплавах, подвергающихся очень высоким скоростям деформации ($10^4 - 10^8$ с⁻¹). Авторы приводят определяющие соотношения для кинематики, кинетики и субструктуры ГЦК металлов с зёрнами микрометрового размера, что соответствует экспериментальным образцам. Основной инновацией данной работы является описание дислокационной структуры в режиме слабого ударного нагружения. Здесь плотности подвижных и неподвижных дислокаций назначаются как внутренние переменные состояния, а для их эволюции формируются зависящие от пути дифференциальные уравнения. Это позволило авторам описать сопротивление скольжению и скорость пластического течения. Разработанная модель применяется к алюминиевому сплаву 6061-T6, а вязкопластические соотношения используются в расчетах стационарных пластических волн, которые позволяют сравнить модель с экспериментами. В качестве подтверждения точности разработанной модели авторы приводят сравнение (рис. 1.6) с экспериментами по соударению пластин, которые были проведены [64].

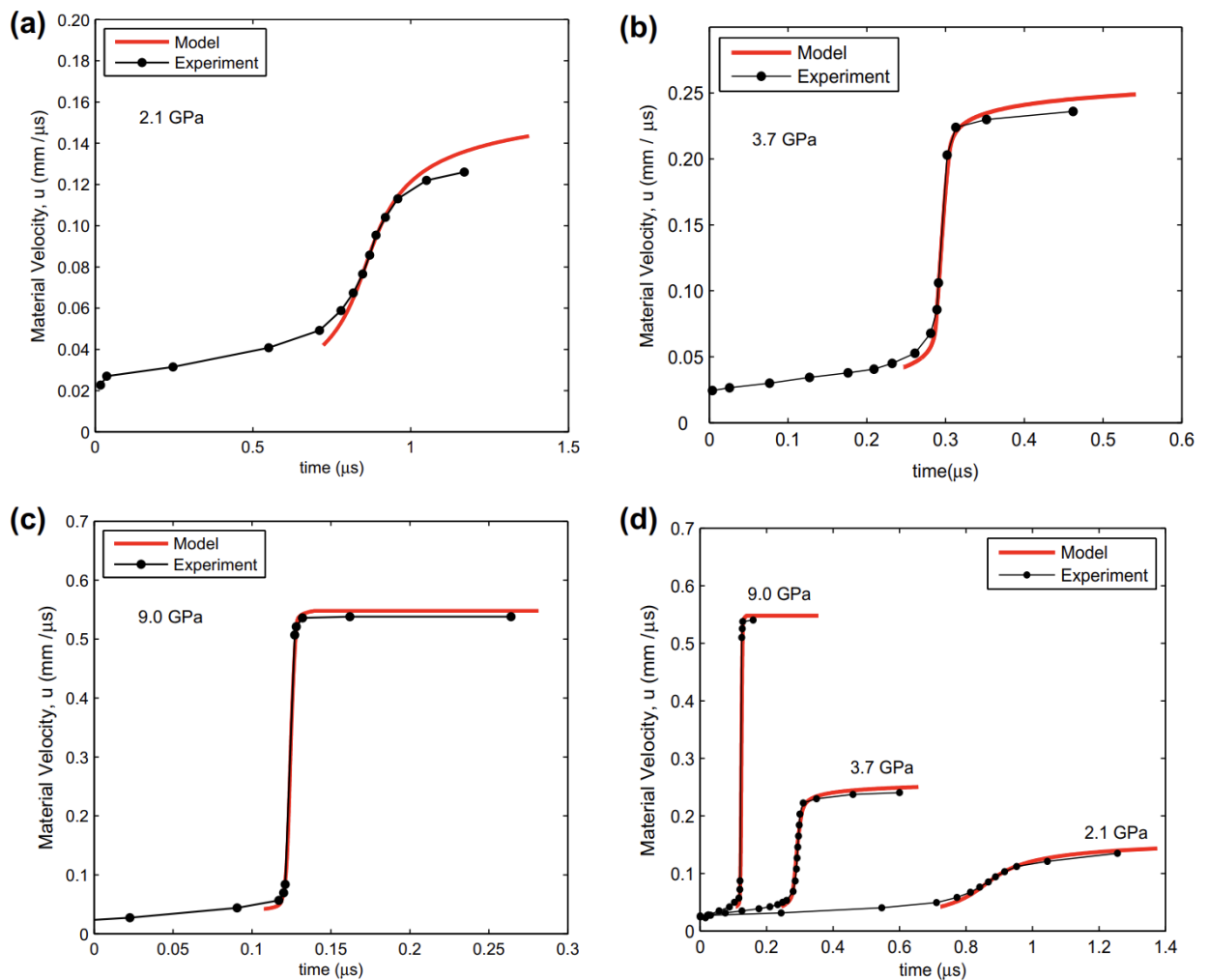


Рис. 1.6. Профили скорости свободной поверхности пластины для алюминиевого сплава 6061-T6, рассчитанные в рамках модели дислокационной пластичности Остина и Макдауэла [58] в сравнении с экспериментами [64].

Одна из наиболее полных моделей дислокационной пластичности предложенная в работе [62]. Она учитывает большое количество физических процессов, таких как перенос дислокаций, нелинейную термоупругость, кинетику дислокаций и согласованные поля внутренних напряжений и деформаций. Модель создавалась для расчета реакции монокристаллов материалов в экстремальных динамических условиях. Перенос дислокаций моделировался с учетом сохранения дислокаций в каждой системе скольжения посредством решения уравнений адвекции и диффузии.

Нелинейная термоупругость обеспечивает термодинамически согласованное уравнение состояния, связывающее напряжение (включая давление), температуру, плотность энергии и ее диссипацию. Пластическая деформация связана с переносом дислокаций уравнением Орована. Геометрически необходимые дислокации порождают внутреннее поле напряжений, которое может тормозить или усиливать течение дислокаций. Поле внутренних деформаций, связанное с полем внутренних напряжений, учитывается в кинематике деформации через декомпозицию полной деформации. Используется слабо нелокальная модель внутреннего напряжения, основанная на градиенте плотности геометрически необходимых дислокаций в каждой конкретной системе скольжения. Схема модели показана на рис. 1.7.

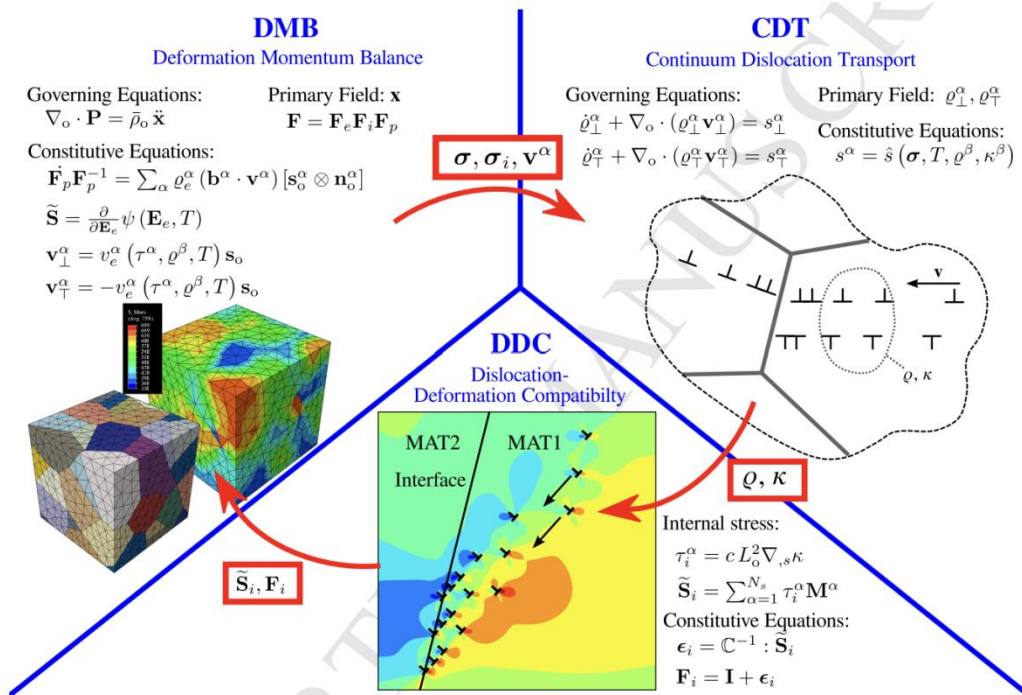


Рис. 1.7. Схема модели дислокационной пластичности [62]. Выделяются три подзадачи: движение сплошной среды (DMB), перенос дислокаций в среде (CDT) и влияние дислокаций на напряжения (DDC).

Скорость релаксации сдвиговых напряжений прямо пропорциональна плотности подвижных дислокаций, поэтому вопрос описания кинетики, в

частности размножения дислокаций, является чрезвычайно важным при построении дислокационных моделей пластичности. Скорость размножения дислокаций, предложенная в [59] на основе энергетического подхода, приводит к зависящей от напряжения скорости размножения дислокаций [65, 66], что эффективно для описания пластической релаксации на фронте ударной волны, в том числе упругого предвестника [63,65]. Введение кинетики иммобилизации дислокаций [60] позволяет описать постепенное увеличение предела текучести за фронтом ударной волны, приводящее к плавной структуре волн разгрузки, следующих за ударной волной [60, 67, 68]. Упрощенный вариант этой модели был предложен в работе [69], где уравнение Орована для скорости пластической деформации было заменено модифицированной моделью релаксации Максвелла с временем релаксации, зависящим от плотности подвижных дислокаций [70] и статическим пределом текучести, зависящим от плотности неподвижных дислокаций.

На основании проведенного обзора была выбрана модель дислокационной пластичности [59, 60] как эффективный метод описания динамической деформации металлов.

1.3. Метод гидродинамики сглаженных частиц (SPH)

К настоящему времени разработано большое количество численных методов, которые позволяют решать различные задачи упругопластики и разрушения материалов, в том числе в трехмерной постановке. В зависимости от поставленной задачи материал может рассматриваться или в рамках приближения сплошной среды, или в подходе, основанном на атомистическом моделировании для наноразмерных масштабов до 1000. При переходе к большим масштабам общепринято рассматривать материал как сплошную среду с использованием уравнений гидродинамики, модифицированных для решений упругопластических задач.

При выборе численного метода необходимо учитывать и выбор системы координат, на которых основан метод. Эйлера система координат

подразумевает движение среды через узлы сетки, при этом система координат остается неподвижной в пространстве. В качестве примера можно привести метод Лакса – Вендроффа [71], который представляет собой численный метод решения гиперболических уравнений в частных производных, основанный на конечных разностях. Этот метод обеспечивает второй порядок точности, как по пространству, так и по времени, и является примером явного интегрирования по времени, когда функция, определяющая основное уравнение, вычисляется в текущий момент времени. Эйлеровы методы обычно используются при решении задач гидро- и газодинамики, когда нет необходимости отслеживать изменение формы тела.

Лагранжева система координат позволяет рассматривать среду с точки зрения частиц, к которым привязаны все их физические параметры, включая координаты, это полезно для отслеживания траекторий, деформации и вращения. Методы, использующие лагранжеву сетку менее подвержены проблемам при нарушении сплошности среды в условиях сильного деформирования или разрушения, чем методы, основанные на эйлеровом подходе. С другой стороны, сеточные лагранжевы методы страдают от искажений сетки в ходе деформации.

Один из самых популярных методов описания деформаций упругопластических тел является метод конечных элементов (МКЭ) [72-77]. В этом методе дискретным элементом среды выступает конечный элемент. Значение искомого поля (скорости, напряжений и т.д.) аппроксимируется внутри конечного элемента той или иной аналитической функцией, коэффициенты которой находятся вариационными методами (уменьшение невязки) через значения в узлах сетки с привлечением дополнительных условий сшивки на границе конечных элементов. Условия сшивки связывают коэффициенты аппроксимирующих функций соседних узлов и приводят к системе алгебраических уравнений с разреженной матрицей. С другой стороны, аналитический вид функций позволяет относительно просто вычислять производные по пространству. К минусам МКЭ можно отнести то,

что точность определения напряжений намного ниже, чем перемещений, хотя именно значения напряжений важны при прочностных расчетах, к тому же значения и перемещений, и напряжений оказываются заниженными. МКЭ в основном предназначен для решения стационарных задач.

Для описания сильных деформаций преимущественно обладают бессеточные методы. Метод частиц состоит в представлении тела совокупностью взаимодействующих частиц (материальных точек или твердых тел), описываемых законами классической механики. Обычно под частицей понимается макроскопический объем вещества, а взаимодействие частиц выражается из уравнений гидродинамики. Одним из вариантов метода частиц является метод молекулярной динамики [78], на протяжении последних десятилетий интенсивно используемый для исследования физико-химических свойств материалов. В классической молекулярной динамике в качестве частиц выступают атомы и молекулы, составляющие материал.

Одним из старейших методов является метод гидродинамики сглаженных частиц (SPH) [79-81]. Первоначально SPH был разработан для решения астрофизических задач. Метод SPH является бессеточным методом, а разрешающая способность метода может быть легко отрегулирована относительно переменных, таких как плотность. Принцип работы SPH заключается в делении вещества на дискретные элементы, которые называются частицами. Эти частицы имеют пространственное расстояние, которое называется «длиной сглаживания» и обычно обозначается как h , на котором их свойства «сглаживаются» или «размазываются» функцией ядра. Это значит, что любая физическая величина любой частицы может быть получена путём суммирования соответствующих величин всех частиц, которые находятся в пределах двух длин сглаживания с учетом значения функции-ядра. Например, напряжение в точке r зависит от напряжений всех частиц на расстоянии $2r$ от искомой. Влияние каждой частицы на свойства оценивается в соответствии с её плотностью и расстоянием до интересующей

частицы. Математически это описывается функцией ядра M . В качестве функции ядра обычно используют кубический сплайн [80]. Функция кубического сплайна равна нулю для частиц, находящихся дальше, чем две сглаженные длины (в отличие от функции Гаусса, где имеется небольшое влияние на любом конечном расстоянии). Это позволяет экономить вычислительные ресурсы, исключая относительно малое влияние отдаленных частиц.

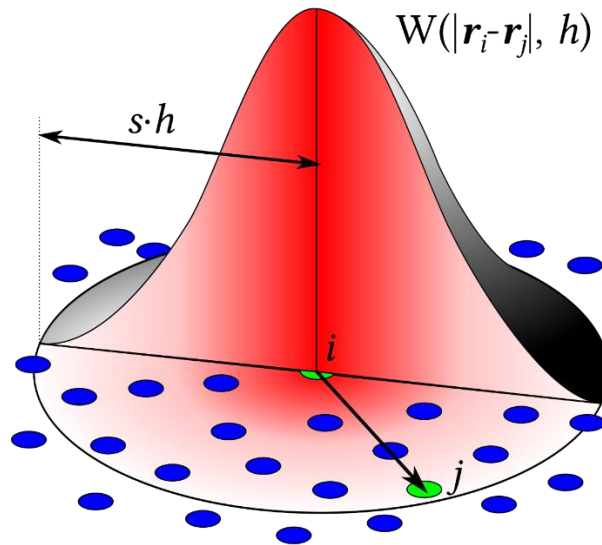


Рисунок 1.7. Схематический вид работы метода SPH. Функция ядра здесь обозначена как W .

Значение произвольной физической величины A в точке r задается уравнением:

$$A(r) = \sum_j m_j \frac{A_j}{\rho_j} M(|r - r_j|, h), \quad (1.4)$$

где m_j - масса частицы j , A_j - значение величины A для частицы j , ρ_j - плотность, связанная с частицей j , M - функция ядра.

Например, плотность частицы i (ρ_i) может быть выражена как:

$$\rho_i = \rho(r_i) = \sum_j m_j \frac{\rho_j}{\rho_j} M(|r - r_j|, h) = \sum_j m_j M(|r - r_j|, h), \quad (1.5)$$

где суммирование по j формально включает все частицы системы, но в реальности вклад дают только те, которые ближе чем $2h$.

SPH позволяет адаптировать длину сглаживания в зависимости от поставленной задачи. Например, в очень плотной области, где много частиц расположены близко одна к другой, длина сглаживания может быть сделана относительно малой, приводя к высокому пространственному разрешению. И наоборот, в областях с малой плотностью, где частицы размещены далеко одна от другой и разрешающая способность низкая, длина сглаживания может быть увеличена, оптимизируя вычисления для данной области. Объединённая с уравнением состояния гидродинамика сглаженных частиц может эффективно симулировать гидродинамические потоки. Однако традиционная формулировка искусственной вязкости, используемая в гидродинамике сглаженных частиц, имеет тенденцию «смазывать» ударные волны и контактные разрывы в гораздо большей степени, чем современные сеточные методы. Несмотря на недостатки SPH является оптимальным выбором для решения упругопластических задач как показано в работах [5, 82-84]. Впервые SPH для решения задач механики сплошной среды предложили в работах [85, 86]. Вышеописанные преимущества делают метод гидродинамики сглаженных частиц оптимальным методом для решения поставленных задач в данном диссертационном исследовании.

1.4. Параметризация численных моделей

Параметризация численных моделей является актуальной проблемой на сегодняшний день [87,88]. Зачастую параметризация заключается в ручном подборе исследователем коэффициентов модели, оказывающих наибольшее влияние на конечное решение. Данный подход является одним из наиболее простых, но при этом исследователь не может с должной точностью оценить влияние каждого параметра модели на конечное решение задачи. Оценить время, которое потребуется для параметризации таким способом практически невозможно, ведь необходимо учитывать как

вычислительные мощности, так и сложность поставленной задачи. При этом нужно учитывать определенный фактор «везения». Все это ставит вопрос о разработке автоматизированных методов параметризации численных моделей, что также позволит формализовать процедуру выбора и обосновать полученный результат.

Мощным инструментом для этого является байесовский статистический метод [12], состоящий из случайного перебора наборов параметров и оценкой квазивероятности (правдоподобности) каждого набора в соответствии с различием между предсказаниями модели и обучающими данными. Для оценки вероятности совпадения численных данных с экспериментальными можно воспользоваться соотношением:

$$P = \exp \left\{ -\sigma \sum_{n=1}^{N^{EXP}} \sum_{j=1}^{N^{PAR}} \left(Y_{j,n}^{EXP} - Y_{j,n}^{NUM} \right)^2 \right\}, \quad (1.6)$$

где σ – постоянная нормировки, $Y_{j,n}^{EXP}$ – экспериментальные данные, а $Y_{j,n}^{NUM}$ – соответствующие им результаты моделирования, N^{PAR} – количество параметров, измеряемых в одном эксперименте, N^{EXP} количество различных экспериментов. Сравнивая результаты расчета со случайным набором коэффициентов модели с экспериментальными данными, можно добиться оптимальной точности подбора коэффициентов для численной модели. Помимо этого, анализируя полученные карты вероятности значений параметров, можно оценить степень влияния параметров и достаточность обучающих данных для локализации области оптимальных параметров. Недостатком метода Байеса является необходимость перебора большого числа наборов параметров и, как следствие, большого количества прогонов модели, что для трехмерных задач требует большого времени счета.

Симплекс метод [89-94] позволяет параметризовать модели, находя оптимальное решение, при этом избегая простого перебора всех возможных угловых точек. Основной принцип действия метода заключается в том, что

вычисления начинаются с определенного базисного или стартового решения, после чего ведется поиск оптимальных, которые улучшают значение целевой функции. Такое возможно в случае, если возрастание какой-либо переменной приведет к увеличению значения функционала. Симплекс метод применим только если задача имеет каноническую форму и у задачи есть явно выделенный базис. N – симплекс (n – размерность симплекса) – это выпуклая оболочка $n + 1$ точки аффинного пространства (размерности n или больше), которые предполагаются аффинно независимыми (т.е. не лежат в подпространстве размерности $n - 1$). Эти точки называются вершинами симплекса. Симплекс может быть охарактеризован как множество всевозможных выпуклых комбинаций своих вершин A_i :

$$\Delta = \left\{ \sum_{i=0}^n t_i A_i : \left(\sum_{i=0}^n t_i = 1 \right) \wedge (\forall i t_i \geq 0) \right\}, \quad (1.7)$$

где t_i для данной точки симплекса называется ее барицентрической координатой.

Симплексный метод был модифицирован с учетом метода минимизации функции [95]. Авторы [96] предложили идею отслеживания оптимальных условий работы путем оценки выходных данных системы в наборе точек, образующих симплекс в факторном пространстве, и постоянного формирования новых симплексов путем отражения одной точки в гиперплоскости. Симплекс приспособливается к местному «ландшафту», вытягиваясь вниз по длинным наклонным плоскостям и сжимаясь вблизи минимума. Критерий остановки процесса выбран с прицелом на его использование для статистических задач, связанных с максимизацией функции правдоподобия, в которую неизвестные параметры входят нелинейно.

Симплексный метод минимизации используется в современных исследованиях, например для параметризации нелокальной модели кристаллической пластичности закаленного мартенсита с использованием

наноиндентирования [97]. В данной работе общая идея оптимизации состоит в том, чтобы воспроизвести реакцию образцов на наноиндентирование и предполагает совместное управление программой экспериментальных исследований и численных расчетов, см. рис. 1.8.

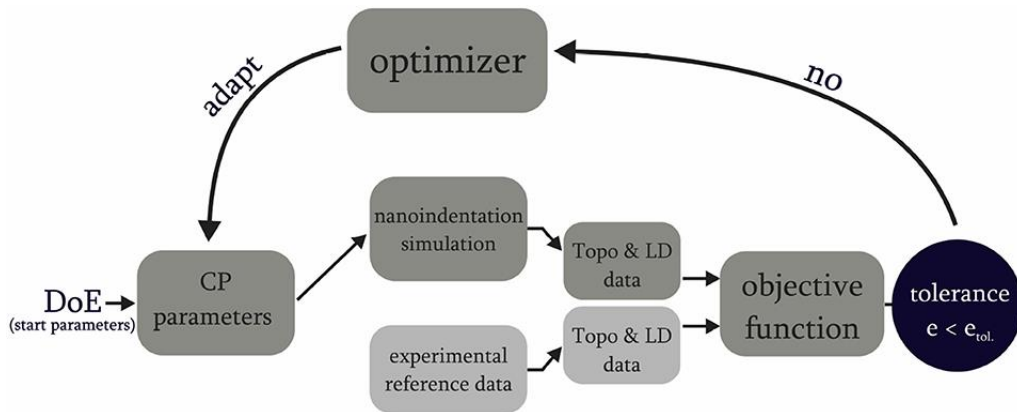


Рис. 1.8. Схематическая иллюстрация итерационного планирования эксперимента и оптимизации параметров модели пластичности кристаллов [97].

Статистический метод Байеса лучше подходит к данному исследованию, при этом подбор параметров модели «напрямую» по оценкам займет слишком много времени, поэтому предлагается эмулировать работу численного метода с помощью искусственной нейронной сети, выступающей в качестве аппроксиматора численной модели.

1.5. Искусственные нейронные сети

Автоматическая параметризация (обучение) теоретических моделей методом Байеса является одним из примеров методов машинного обучения. Машинное обучение, в свою очередь, это одно из направлений исследований в области искусственного интеллекта, связанное с разработкой и изучением статистических алгоритмов, которые позволяют эффективно аппроксимировать нужную зависимость данных, таким образом задачи выполняются без явных инструкций [98]. Впервые термин «машинное обучение» был введен Артуром Сэмюэлом [99,100]. Современное машинное

обучение преследует две цели: одна - классифицировать данные на основе разработанных моделей, другая - делать прогнозы о будущих результатах на основе этих моделей. Как научная деятельность, машинное обучение возникло в результате поисков методов создания искусственного интеллекта (ИИ). На заре ИИ как академической дисциплины некоторые исследователи были заинтересованы в том, чтобы машины учились на данных. Они попытались подойти к проблеме с помощью различных символических методов, а также того, что тогда называлось «нейронными сетями»; в основном это были перцептроны и другие модели, которые позже оказались переосмыслением обобщенных линейных моделей статистики [101].

В качестве одного из методов машинного обучения стоит выделить искусственную нейронную сеть (ИНС). ИНС в отличие от других методов машинного обучения, которые зачастую подразумевают наличие дерева принятия решений, может эмулировать работу численного метода, выступая в качестве аппроксиматора данных со сложной или неизвестной функциональной зависимостью. ИНС представляет собой систему соединённых и взаимодействующих между собой нейронов (искусственных нейронов). Такие нейроны обычно довольно просты по математической структуре. Каждый нейрон подобной сети имеет дело только с сигналами, которые он периодически получает, и сигналами, которые он периодически посылает другим нейронам. И, тем не менее, будучи соединёнными в достаточно большую сеть с управляемым взаимодействием, такие по отдельности простые нейроны вместе способны выполнять сложные задачи. С точки зрения машинного обучения, нейронная сеть представляет собой частный случай методов распознавания образов, дискриминантного анализа; а с точки зрения математики, обучение нейронных сетей — это многопараметрическая задача нелинейной оптимизации. Нейронные сети не программируются в привычном смысле этого слова, они обучаются. Возможность обучения — одно из главных преимуществ нейронных сетей перед традиционными алгоритмами. Технически обучение заключается в

нахождении коэффициентов связей между нейронами. В процессе обучения нейронная сеть способна выявлять сложные зависимости между входными данными и выходными, а также выполнять обобщение. Это значит, что в случае успешного обучения сеть сможет вернуть верный результат на основании данных, которые отсутствовали в обучающей выборке, а также неполных и/или «зашумленных», частично искажённых данных. Схема простой нейросети показана на рис. 1.9.

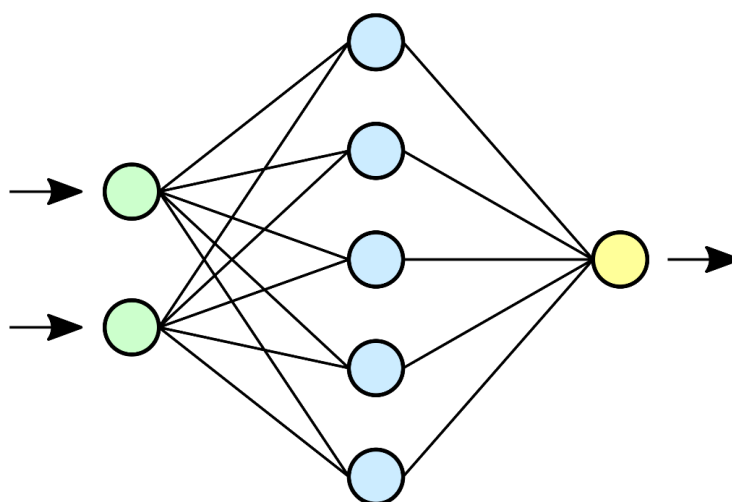


Рисунок 1.9. Схема простой нейронной сети. Слева направо: входные нейроны, скрытые нейроны и выходной нейрон.

Нейронные сети могут аппроксимировать непрерывные функции. Доказана обобщённая аппроксимационная теорема [102]: с помощью линейных операций и каскадного соединения можно из произвольного нелинейного элемента получить устройство, вычисляющее любую непрерывную функцию с некоторой наперёд заданной точностью. Это означает, что нелинейная характеристика нейрона может быть произвольной: от сигмоидальной до произвольного волнового пакета или вейвлета, синуса или многочлена. От выбора нелинейной функции может зависеть сложность конкретной сети, но с любой нелинейностью сеть остаётся универсальным аппроксиматором.

ИНС активно применяется в механике материалов [84,103-105]. В настоящее время ИНС плодотворно используются для обобщения расчетных данных как SPH [106-109], так и метода конечных элементов [110] для решения различных инженерных задач. ИНС может быть встроена в моделирование методом конечных элементов [111] или конечной разности [112] как быстродействующая часть многомасштабной модели. В [113] показано, что сложная зависимость между компонентами тензора упругой деформации и напряжений может быть эффективно аппроксимирована ИНС, обученной на данных молекулярной динамики (МД). Подобный подход был обоснован в [5] для получения скалярного УРС меди. Скалярное УРС связывает плотность и внутреннюю энергию с давлением и температурой материала. Обычно она строится в аналитической [114] или табличной форме, но в [5] ее заменяет ИНС.

В рамках диссертационного исследования ИНС используется и в качестве уравнения состояния, и как аппроксиматор зависимости геометрических параметров образца после соударения от параметров модели, то есть эмулятор кода SPH, для ускорения работы алгоритма байесовской оптимизации параметров.

Выводы по первой главе

Описание динамической деформации металлов при решении различных научных и инженерных задач требует разработки надежной и универсальной теоретической модели, учитывающей основные физические процессы пластического течения, а также методов ее автоматизированной параметризации по набору обучающих экспериментальных данных с использованием легких в практической реализации экспериментов.

На основе проведенного обзора литературы была выбрана модель дислокационной пластичности [59,60], хорошо описывающая структуру ударных волн и волн разрежения, а также учитывающая начальную дефектную структуру материала и ее эволюцию в процессе нагружения. В

качестве численного метода для обобщения модели дислокационной пластичности на трехмерный случай был выбран метод сглаженных частиц (SPH) [79,80,81], который является достаточно универсальным и простым в реализации бессеточным методом. В качестве метода динамических испытаний для генерации наборов экспериментальных данных выбраны тесты Тейлора [1,2,3,4], сочетающие большие деформации и высокие скорости деформации, не требующие сложного оборудования для своей реализации, поскольку основная информация о процессе деформации может быть извлечена из финальной формы образцов. Сложность аналитических оценок из-за неоднородности деформации при таких испытаниях может быть скомпенсирована использованием численных методов и методов машинного обучения. Среди методов машинного обучения выбран метод Байеса как статистический метод параметризации теоретической модели и искусственные нейронные сети как универсальные аппроксиматоры – для замены в процессе параметризации трехмерного SPH кода его быстрым эмулятором.

Глава 2. Трехмерная теоретическая модель динамической деформации металлов на основе дислокационной пластичности и SPH

В данной главе впервые проведено обобщение теоретической модели дислокационной пластичности металлов [59,60] на трехмерный случай. В качестве численного метода используется бессеточный метод сглаженных частиц. Модель дислокационной пластичности дополнена подмоделью для оценки измельчения зерен и образования порообразных структур в процессе динамической деформации. В качестве уравнения состояния предложено использовать ИНС, обученную на результатах МД моделирования деформации представительного объема металла. Описана численная реализация модели и результаты тестовых расчетов.

2.1. Модель дислокационной пластичности и ее численная реализация

В диссертационном исследовании трехмерная модель динамической деформации металлов строиться на основе модели дислокационной пластичности, которая была впервые предложена в [59] и усовершенствована в [60] за счет введения более детальной кинетики дислокаций с учетом иммобилизованных дислокаций и более сильного упрочнения. Ранее модель была численно реализована в одномерном [59, 60, 65, 115] и двумерном [24, 66] случаях с использованием конечно-разностной схемы.

Законы сохранения составляют ядро динамической модели механики сплошной среды [116] и определяют эволюцию плотности ρ , скорости вещества \mathbf{v} и удельной внутренней энергии E_{Σ} , которую можно представить в виде суммы $E_{\Sigma} = E + E_S + E_D$, где E – часть, связанная с гидростатическим сжатием и нагревом, E_S – часть, связанная с упругим изменением формы, и

E_D – энергия дефектов решетки (дислокаций). Используя лагранжеву систему отсчета, законы сохранения записываются следующим образом:

$$\frac{d\rho}{dt} = -\rho(\nabla \cdot \mathbf{v}), \quad (2.1)$$

$$\rho \frac{d\mathbf{v}}{dt} = (\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}), \quad (2.2)$$

$$\rho \frac{dE}{dt} = -P(\nabla \cdot \mathbf{v}) + \beta(\mathbf{S} : \dot{\mathbf{w}}), \quad (2.3)$$

где $\boldsymbol{\sigma} = -P\mathbf{I} + \mathbf{S}$ есть тензор напряжений, P – давление и \mathbf{S} – тензор девиаторов напряжений; \mathbf{I} является единичным тензором. Последний член в правой части уравнения (2.3) представляет собой нагрев за счет пластически рассеянной механической энергии, где $\dot{\mathbf{w}}$ – скорость пластической деформации, β – коэффициент Тейлора–Квинни [117], в данном исследовании предполагается, что $\beta = 0.9$. Как показано в [115], работа девиаторов напряжений сначала накапливается в E_S а потом переходит в E и E_D за счет пластической диссипации.

Для применения уравнений (2.2) и (2.3) необходимо рассчитать напряжения $\boldsymbol{\sigma} = -P\mathbf{I} + \mathbf{S}$. Давление P и температуру T можно выразить через уравнение состояния, зная два других термодинамических параметра, плотность ρ и "гидростатическую" часть E внутренней энергии. Для этого используется уравнение состояния в виде искусственной нейронной сети (ИНС), как описано в разделе 2.3. Девиатор напряжения \mathbf{S} определяется упругопластическим поведением. Упругопластическое состояние описывается тензором макроскопических деформаций \mathbf{u} и тензором пластической деформации \mathbf{w} . В случае малых упругих деформаций можно использовать разницу $\mathbf{u} - \mathbf{w}$ в качестве тензора упругих деформаций, применим закон Гука [118]:

$$\mathbf{S} = 2G \left[\mathbf{u} - \frac{1}{3} \text{tr}(\mathbf{u})\mathbf{I} - \mathbf{w} \right], \quad (2.4)$$

где G модуль сдвига. Эволюция тензора макроскопических деформаций определяется следующим образом:

$$\frac{d\mathbf{u}}{dt} = \frac{1}{2} \left[(\nabla \otimes \mathbf{v}) + (\nabla \otimes \mathbf{v})^T \right] + \left[(\mathbf{u} \cdot \dot{\mathbf{R}}) + (\dot{\mathbf{R}}^T \cdot \mathbf{u}) \right], \quad (2.5)$$

где верхний индекс «Т» означает транспонирование, а « \otimes » означает диадное произведение тензоров. Первый член в правой части уравнения (2.5) представляет собой скорость деформации, а второй член учитывает вращение элементов вещества с тензором скорости вращения:

$$\dot{\mathbf{R}} = \frac{1}{2} \left[(\nabla \otimes \mathbf{v}) - (\nabla \otimes \mathbf{v})^T \right]. \quad (2.6)$$

Изменение \mathbf{w} определяется как скоростью пластической деформации $\dot{\mathbf{w}}$, так и вращением:

$$\frac{d\mathbf{w}}{dt} = \dot{\mathbf{w}} + \left[(\mathbf{w} \cdot \dot{\mathbf{R}}) + (\dot{\mathbf{R}}^T \cdot \mathbf{w}) \right]. \quad (2.7)$$

Пластичность обеспечивается скольжением дислокаций и описывается уравнением Орована:

$$\dot{\mathbf{w}} = \sum_{\delta} b \mathbf{M}^{\delta} \rho_D^{\delta} V_D^{\delta}, \quad (2.8)$$

Где индекс $\delta \in [1,12]$ нумерует системы скольжения ГЦК кристалла [119], представленного четырьмя плоскостями скольжения, эквивалентными плоскости (111) и трем векторам Бюргерса в каждой плоскости, эквивалентным направлению [110]; b – модуль вектора Бюргерса; ρ_D^{δ} есть скалярная плотность подвижных дислокаций в соответствующей системе скольжения, а V_D^{δ} – скорость скольжения дислокаций данной системы скольжения относительно вещества. Тензор ориентации \mathbf{M}^{δ} определяется как симметричная часть бинарного произведения направления вектора Бюргерса \mathbf{b}^{δ}/b и нормали к плоскости скольжения \mathbf{n}^{δ} :

$$\mathbf{M}^{\delta} = \frac{1}{2b} \left[(\mathbf{b}^{\delta} \otimes \mathbf{n}^{\delta}) + (\mathbf{b}^{\delta} \otimes \mathbf{n}^{\delta})^T \right]. \quad (2.9)$$

Изменение тензора ориентации во времени определяется вращением элементов вещества:

$$\frac{d\mathbf{M}^\delta}{dt} = \left[(\mathbf{M}^\delta \cdot \dot{\mathbf{R}}) + (\dot{\mathbf{R}}^T \cdot \mathbf{M}^\delta) \right]. \quad (2.10)$$

Начальная ориентация системы скольжения одинакова для всех точек монокристалла, тогда как в поликристалле она различается между зернами. Чтобы имитировать поликристаллический образец, в каждой SPH частице, либо в каждой ячейке расчетной сетки случайным образом задаются различные начальные ориентации кристалла, как это было предложено в [59].

Сила Пича-Келера [118,120] на единицу длины дислокации, действующая на дислокации δ -й системы скольжения в направлении скольжения, равна:

$$F^\delta = b(\mathbf{M}^\delta : \mathbf{S}). \quad (2.11)$$

Инерция дислокаций очень мала: время установления равновесия составляет около 10^{-11} с [121], что намного меньше временного шага для макроскопического моделирования. Поэтому для скорости дислокации используется квазистационарное решение [115,121]:

$$V_D^\delta = \frac{c_t \zeta^\delta}{6\sqrt{6}\chi^\delta} \left[(\chi^\delta)^{2/3} - 12 \right]^{3/2}, \quad (2.12)$$

$$\zeta^\delta = \frac{1}{c_t B} \left(F^\delta - \frac{bY_s}{2} \text{sign}(F^\delta) \right) \cdot H \left(|F^\delta| - \frac{bY_s}{2} \right), \quad (2.13)$$

$$\chi^\delta = 108 |\zeta^\delta| + 12\sqrt{3} \sqrt{4 + 27 |\zeta^\delta|}, \quad (2.14)$$

где $H(\cdot)$ – функция Хевисайда; $c_t = \sqrt{G/\rho}$ – поперечная скорость звука; Y_s – статический предел текучести. Для меди коэффициент трения B при комнатной температуре взят из МД моделирования [122], а зависимость от температуры принята такой же, как для алюминия [121] (таблица 2.1.)

Кинетика дислокаций учитывает как подвижные, так и неподвижные дислокации, характеризующиеся скалярными плотностями ρ_D^δ и ρ_1^δ ,

соответственно. Уравнения кинетики выражают баланс скоростей размножения Q_D^δ , иммобилизации Q_I^δ и аннигиляции подвижных дислокаций Q_A^δ и аннигиляции подвижных дислокаций с неподвижными Q_{AI}^δ [60]:

$$\frac{d\rho_D^\delta}{dt} = Q_D^\delta - Q_I^\delta - Q_A^\delta - Q_{AI}^\delta - \rho_D^\delta (\nabla \cdot \mathbf{v}), \quad (2.15)$$

$$\frac{d\rho_I^\delta}{dt} = Q_I^\delta - Q_{AI}^\delta - \rho_I^\delta (\nabla \cdot \mathbf{v}). \quad (2.16)$$

Для расчета скорости размножения дислокаций используется энергетический подход, предложенный в [59]:

$$Q_D^\delta = k_D b \rho_D^\delta |F_D^\delta V_D^\delta|, \quad (2.17)$$

где коэффициент генерации $k_D = (1 - \beta)/(8 \text{ eV})$ представляет собой часть $(1 - \beta)$ мощности пластической диссипации $\rho_D^\delta |F_D^\delta V_D^\delta|$, затрачиваемой на образование новых дефектов, отнесенную к энергии образования дислокаций, приходящейся на длину одного вектора Бюргерса, равную примерно 8 эВ. Скорость иммобилизации можно записать следующим образом [60]:

$$Q_I^\delta = V_I (\rho_D^\delta - \rho_D^{\text{free}}) \sqrt{\rho_I^\delta}, \quad (2.18)$$

где ρ_D^{free} – пороговое значение плотности дислокаций, при котором начинается иммобилизация. Уравнение (2.18) описывает образование в ходе этого процесса прочных дислокационных структур с постоянной скоростью V_I движения дислокаций.

Скорость аннигиляции записывается обычным образом:

$$Q_A^\delta = 2k_A b |V_D^\delta| (\rho_D^\delta)^2, \quad Q_{AI}^\delta = k_A b |V_D^\delta| (\rho_D^\delta \rho_I^\delta), \quad (2.19)$$

где k_A – коэффициент аннигиляции. Начальные значения плотности дислокаций в каждой системе скольжения и параметры кинетической модели собраны в таблице 2.1.

Исследуемые образцы могут иметь изначально высокую плотность дислокаций, которая дополнительно увеличивается при динамических испытаниях. Поэтому деформационное упрочнение является важным фактором, определяющим пластическое течение при испытаниях Тейлора. Деформационное упрочнение учитывается по закону Тейлора:

$$Y_s = Y_{s0} + A_1 G b \sqrt{\rho_1}, \quad \rho_1 = \sum_{\delta} \rho_1^{\delta}, \quad (2.20)$$

где Y_{s0} – статический предел текучести в материале без дислокации. Уравнение (2.20) учитывает только иммобилизованные дислокации, как вносящие основной вклад в упрочнение. Большое значение коэффициента A_1 может быть связано с дислокационными структурами, состоящими из неподвижных дислокаций и создающим сильные препятствия для движения подвижных дислокаций. Сильное упрочнение иммобилизованными дислокациями позволяет описать структуру волны разгрузки, распространяющейся за ударной волной в экспериментах по соударению пластин [60,67,68]. Изотропное упрочнение учитывается в уравнении (2.20); более подробное описание монокристаллов может быть достигнуто при учете анизотропного упрочнения [14,123,124], но для поликристаллов оно избыточно.

Параметры модели дислокационной пластичности для меди собраны в таблице 2.1. Большинство из них взяты из предыдущих работ, а некоторые параметры, в том числе коэффициент упрочнения A_1 , скорость иммобилизации V_1 и начальная плотность иммобилизованных дислокаций $\rho_1^{\delta}(t=0)$, адаптированы к данным экспериментам. Показано, что подбор этих трех параметров статистическим методом Байеса позволяет адекватно описать деформации всех рассматриваемых в проведенных нами тестах Тейлора форм образцов. В случае латуни проводилась параметризация большего числа параметров модели, что обсуждается в разделе 4.3.

Таблица 2.1. Параметры модели дислокационной пластичности меди. Большинство параметров взяты из [60]. Коэффициент трения дислокаций взят из МД моделирования [121,122]. «Оптимизировано» в столбце «Источник» означает, что параметры подобраны для настоящих экспериментов с помощью байесовского статистического метода (раздел 4.1).

Параметр	Значение	Источник
B [Pa×s]	$0.45 \cdot 10^{-5} + 2.5 \cdot 10^{-8} \times T$	[121, 122]
μ	0.34	[60]
Y_{s0} [МПа]	30	[60]
A_I	2.8*	Оптимизировано
V_I [m/s]	0.4*	Оптимизировано
k_D [J ⁻¹]	$7.8 \cdot 10^{16}$	[60]
k_A	5	[60]
ρ_D^{free} [m ⁻²]	10^{11}	[60]
$\rho_D^\delta(t=0)$ [m ⁻²]	10^{11}	[60]
$\rho_I^\delta(t=0)$ [m ⁻²]	$6.3 \cdot 10^{12} *$	Оптимизировано

2.2. Измельчение зерна и ослабленные участки (порообразные структуры)

Исходная модель дислокационной пластичности [60] сводит модификацию микроструктуры материала к изменению плотностей подвижных и неподвижных дислокаций, уравнения (2.15) и (2.16), в то время как в реальных материалах за счет пластической деформации может формироваться ряд специфических микроструктур. Измельчение зерна и образование порообразных структур наблюдают с помощью оптической микроскопии как для классических, так и для профилированных цилиндров (глава 3). Для учета этих эффектов была проведена модификация модели пластичности дислокаций с включением подмоделей измельчения зерен и образования порообразных структур. Размер зерна является одной из основных характеристик поликристаллического материала, а образование ослабленных участков материала (порообразных структур) является

предвестником разрушения. Все это подчеркивает важность развития теоретической модели для оценки этих процессов.

Предложенный в [59,60] энергетический подход к размножению дислокаций показал себя как эффективный метод при решении динамических задач. Согласно уравнению (2.17), часть работы пластической диссипации передается дислокационной подсистеме, но дислокации не могут накапливать эту работу бесконечно: плотность дислокаций выходит на насыщение за счет аннигиляции, уравнение (2.19), и суммарную мощность, выделяющаяся в единице объема вследствие аннигиляции, можно рассчитать следующим образом:

$$\Pi = \varepsilon_D \sum_{\delta} (Q_A^{\delta} + 2Q_{AI}^{\delta}), \quad (2.21)$$

где $\varepsilon_D = 8eV/b$ – энергия дислокации, приходящаяся на единицу длины линии дислокации. В модели [60] аннигиляционные члены выражают все эффекты уменьшения плотности дислокаций, которые в реальном материале включают поглощение границами зерен (ГЗ), приводящее к увеличению угла разориентации и образованию большеугловых границ зерен. Таким образом, можно сделать вывод, что часть η_{GB} выделяемой мощности (2.21) расходуется на формирование большеугловых ГЗ, т. е. на измельчение зерна. Площадь поверхности ГЗ в единице объема можно оценить как отношение поверхности куба к объему куба, деленное на 2 (поскольку каждая граница принадлежит двум зернам): $3/d$, где d – размер зерна (диаметр). Энергия границ зерен сложным образом зависит от разориентации и имеет определенные минимумы для конкретных разориентаций [125]; кроме того, эта энергия повышена для метастабильных состояний ГЗ [126]. Тем не менее, энергию границ зерен общего типа в меди можно оценить на уровне $\gamma_{GB} = 0.5 \text{ J/m}^2$ [125]. Таким образом, локальное измельчение зерна к моменту t можно оценить как:

$$d = \left[d_0^{-1} + \frac{\eta_{GB}}{3\gamma_{GB}} \int_0^t \Pi dt' \right]^{-1}, \quad (2.22)$$

где d_0 – начальный диаметр зерна до динамического нагружения $d_0 = d(t=0) \approx 18 \mu\text{m}$.

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

$$f = \frac{(1 - \eta_{GB})}{\varepsilon_s n_0} \int_0^t \Pi dt', \quad (2.23)$$

где $n_0 \sim 10^{29} \text{ m}^{-3}$ – концентрация атомов, $\varepsilon_s \approx Gb^3 \approx 4.5 \text{ eV}$ – энергия сублимации. Атомистический механизм такого преобразования энергии может заключаться в образовании вакансий и кластеров дефектов при аннигиляции дислокаций, что наблюдается в МД исследованиях [127,128]. Мы не считаем, что наблюдаемые порообразные структуры являются реальными порами, образованными вакансиями, «сублимированными атомами» или за счет пластического роста пор под действием отрицательного давления, поскольку рассчитанная эволюция напряжений не выявляет достаточно высоких отрицательных давлений в образце. Порообразные структуры представляют собой достаточно ослабленные участки с неупорядоченной поверхностью, которые выкрашиваются при травлении шлифа перед микроскопированием. Предполагая, что атомные связи полностью разорваны только на площади поверхности толщиной b вокруг каждой пороподобной структуры, тогда объемная доля этих ослабленных областей оценивается следующим образом:

$$\alpha = \frac{(\pi D^3/6)}{(\pi D^2 b)} f = \frac{D(1 - \eta_{GB})}{6b\varepsilon_s n_0} \int_0^t \Pi dt', \quad (2.24)$$

где D – диаметр порообразных структур. Оптическая микроскопия дает диаметры в диапазоне от 10 до 40 мкм и $D = 20 \mu\text{m}$ используется в качестве оценки.

Полученные уравнения (2.22) и (2.24) позволяют оценить эффекты измельчения зерна и образования ослабленных зон в рамках модели дислокационной пластичности в сравнении с экспериментальными данными. Относительно распределения энергии между этими двумя процессами, просто предполагаем $\eta_{\text{GB}} = 0.5$. Кроме того, уравнения (2.23) и (2.24) могут быть непосредственно использованы для построения модели разрушения металлических материалов при пластической деформации.

2.3. Уравнение состояния в виде ИНС

Гидростатическая часть внутренней энергии E и плотность ρ определяют давление, модуль всестороннего сжатия K и температуру T с помощью уравнения состояния:

$$P = P_{\text{EOS}}(\rho, E), \quad K = K_{\text{EOS}}(\rho, E), \quad T = T_{\text{EOS}}(\rho, E), \quad (2.25)$$

а модуль сдвига G можно выразить через объемный модуль K и коэффициент Пуассона μ [60]:

$$G = \frac{2}{3} K \frac{1 - 2\mu}{1 + \mu}. \quad (2.26)$$

Уравнение состояния строится в виде искусственной нейронной сети (ИНС), обученной по данным МД для гидростатического сжатия и растяжения репрезентативных объемных элементов меди. Хотя в случае нелинейно-упругого поведения монокристаллов металлов напряжения сдвига и давления связаны между собой [113], при моделировании ударных волн и динамического воздействия обычно постулируется независимость между давлением и напряжением сдвига, поскольку упругие деформации остаются малыми. Тензорное уравнение состояния на основе ИНС построено в [113] для ограниченных случаев деформации. В случае произвольной 3D-

деформации эта процедура требует гораздо большего количества данных МД моделирования. Поэтому в настоящей работе используется скалярное уравнение состояния.

Уравнение состояния отображает входной вектор $\{\rho; E\}$ в выходной $\{P; T; K\}$. Для подготовки обучающих данных было исследовано гидростатическое сжатие меди до 100 ГПа и ее растяжение до разрушения с использованием МД-моделирования для температур в диапазоне от 100 до 900 К. Всесторонняя деформация прикладывалась с постоянной скоростью инженерной деформации 10^9 нс⁻¹ при постоянной температуре, поддерживаемой термостатом Ноуза-Гувера [129]. МД система содержала полмиллиона атомов. Моделирование проводилось с использованием пакета LAMMPS [130] и силового поля [131], которое широко используется и проверено для систем Cu, Al и Al-Cu. Полная кинетическая энергия и теорема вириала использовались для расчета среднего давления [132], а рассчитанные кривые напряжение-деформация и энергия-деформация использовались для обучения ИНС. Объемный модуль находили как наклон кривой зависимости давления от объемной деформации, определяемый методом наименьших квадратов. Обработка данных МД позволила подготовить пары входных $\{\rho; E\}$ и выходных $\{P; T; K\}$ векторов; всего набор обучающих данных содержал 2550 пар.

Известно, что ИНС является хорошим выбором для аппроксимации сложных зависимостей без predetermined функциональной формы [133,134]. Структура используемой ИНС показана на рис. 2.1 Она содержит 4 скрытых слоя по 16 нейронов «Leakly ReLU» в каждом.

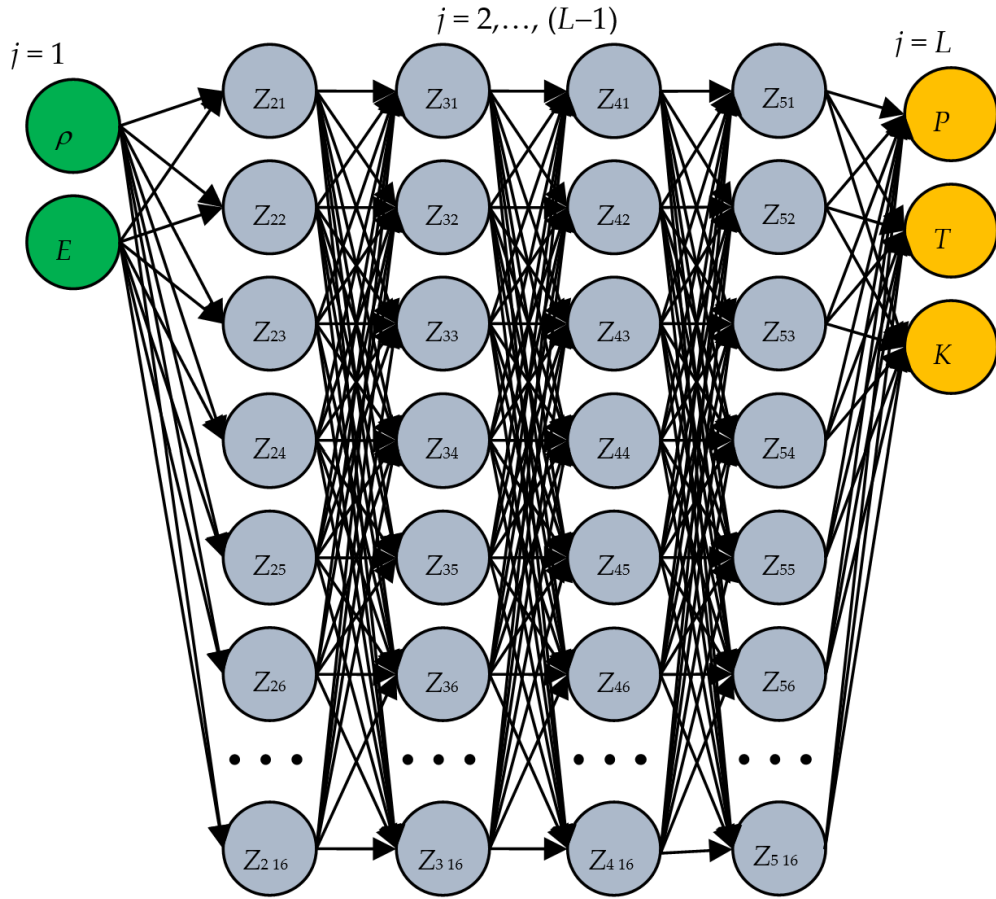


Рис. 2.1. Структура ИНС прямого распространения для уравнения состояния: 4х16 скрытых слоев, 3 входа и 6 выходов; нейроны упорядочены слоями, сигналы передаются в одном направлении – от входного слоя к выходному.

Выходной слой содержит 3 «сигмовидных» нейрона в соответствии с количеством выходных значений. Общее количество слоев $L = 6$ включает входной, который только передает входные значения нейронам второго слоя. Сигнал k -го нейрона j -го слоя можно рассчитать следующим образом:

$$Z_{jk} = f_j \left(-b_{jk} + \sum_{m=1}^{N_{(j-1)}} a_{jk,m} Z_{(j-1)m} \right), \quad j = 2, \dots, L, \quad (2.27)$$

где веса $a_{jk,m}$, и смещения b_{jk} являются параметрами, подобранными во время обучения; N_j – количество нейронов j -го слоя; $f_j(\cdot)$ – передаточная функция j -го слоя. Передаточная функция для нейронов «Leaky ReLU» $j = 2, \dots, (L-1)$:

$$f_j(z) = \begin{cases} z & \text{at } z \geq 0, \\ 0.01 \cdot z & \text{at } z < 0, \end{cases} \quad (2.28)$$

в то время как передаточная функция для «сигмовидных» нейронов $j = L$:

$$f_j(z) = \frac{1}{1 + \exp(-z)}. \quad (2.29)$$

Последовательный расчет сигналов, уравнение (2.27), от $j = 2$ до $j = L$ позволяет найти выходной вектор, начиная с входного, если известны веса и смещения.

Применяемая процедура обучения подробно описана в работах [113,135]. Она заключается в последовательной минимизации ошибки аппроксимации путем случайного изменения параметров ИНС в направлениях, противоположных соответствующему градиенту ошибки по параметрам. Градиент можно найти с помощью набора матричных умножений, называемых «алгоритмом обратного распространения». Выбор структуры ИНС обсуждается в [113] для более сложного случая тензорного уравнения состояния. Здесь аппроксимируемая функция проще, и для сокращения времени вычислений при последующем 3D-моделировании применяется более простую ИНС с 16 нейронами на слой вместо 64 нейронов на слой, использованных в [113]. Такая структура ИНС позволяет получить среднюю ошибку около 0,8% и максимальную ошибку около 5%; сравнение прогнозов обученной ИНС с набором обучающих данных из МД показано на рисунке 2.2. Валидация обученной ИНС выполняется путем сравнения с данными МД для промежуточных температур 350 К и 550 К. Аналогично [113] ошибка на тестовом наборе данных возникает меньше, чем на обучающем; поэтому эта процедура кажется избыточной для гладких данных. Разработанное уравнение состояния представляет собой файла с весами и смещениями нейронов, который совместно с уравнениями (2.27)–(2.29) для обработки сигналов ИНС позволяет вычислить нужные параметры.

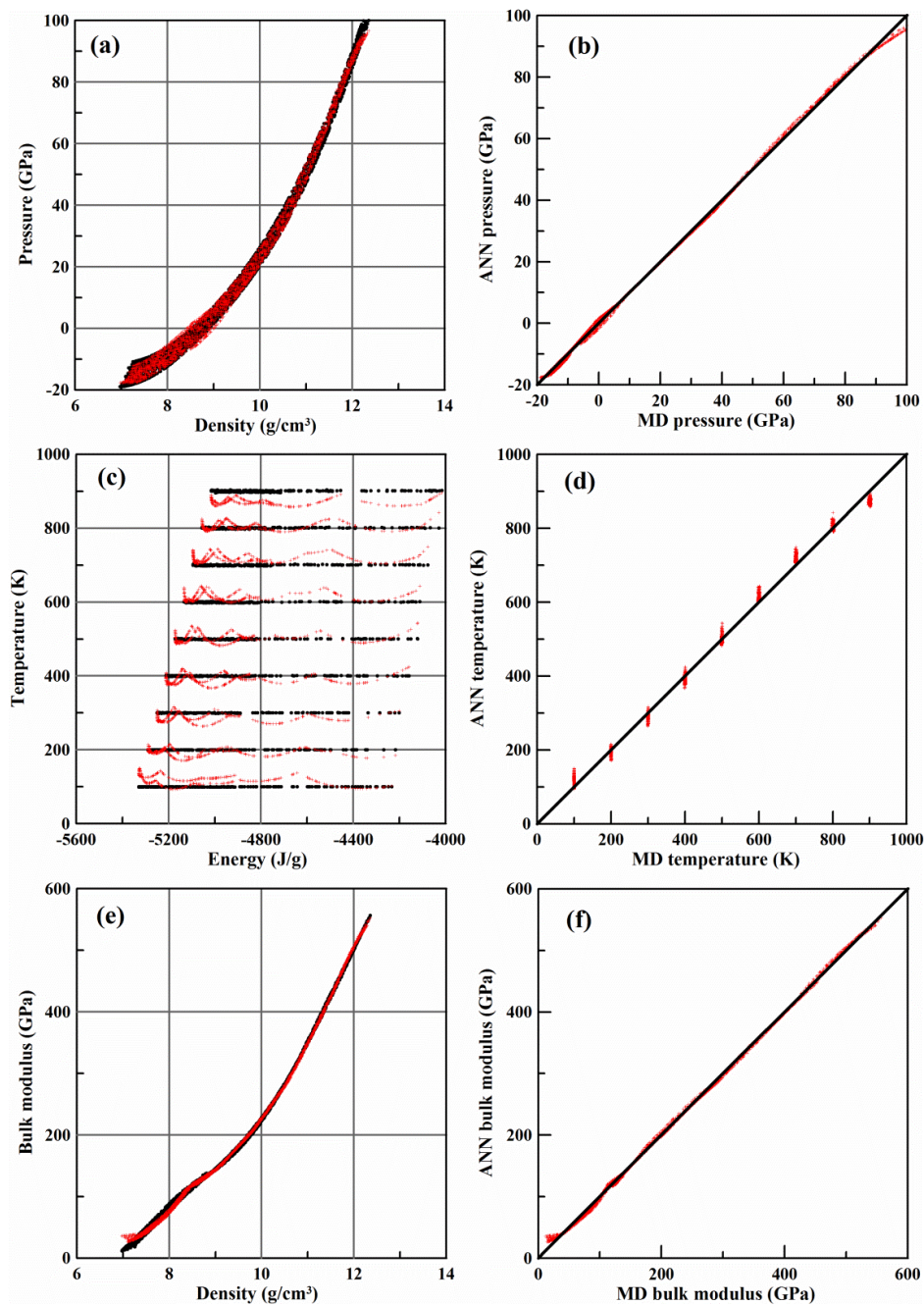


Рис. 2.2. Уравнение состояния меди: (а, б, в) результаты ИНС (красные крестики) в сравнении с данными МД обучающего набора данных для (а) давления, (б) температуры и (в) модуля объемного сжатия; (б, г, е) – соответствующие корреляционные графики, где черной линией показан идеальный случай полного совпадения.

2.4. Численная схема SPH

Уравнения с пространственными производными, такие как уравнения (2.1)–(2.3), (2.5) и (2.6), решаются численно с использованием подхода гидродинамики сглаженных частиц (SPH – smoothed particle hydrodynamics) [80,81,136]. В рамках этого подхода сплошная среда разбивается на частицы, а механические характеристики каждой частицы размываются вокруг ее центра с помощью сглаживающего ядра $M(\mathbf{x} - \mathbf{x}^b, h)$, где \mathbf{x}^b – радиус-вектор центра частицы, \mathbf{x} – радиус-вектор пространственной точки, где определяются характеристики, h – линейный масштаб сглаживания. Ядро должно быть нормировано на 1, должно быстро убывающее с ростом $|\mathbf{x} - \mathbf{x}^b|$ и быть близкое к нулю вдали от частицы, где $|\mathbf{x} - \mathbf{x}^b| \gg h$. Применим широко используемое ядро, основанное на кубическом сплайне [80]:

$$M(\mathbf{x} - \mathbf{x}^b, h) = \frac{1}{4\pi h^3} \begin{cases} (2-q)^3 - 4(1-q)^3, & \text{for } 0 \leq q \leq 1, \\ (2-q)^3, & \text{for } 1 < q \leq 2, \\ 0, & \text{for } q > 2, \end{cases} \quad (2.30)$$

где $q = h^{-1}|\mathbf{x} - \mathbf{x}^b|$ безразмерное расстояние. Механическая характеристика, обозначаемая как A , которая может быть массовой плотностью, напряжениями или скоростью, может быть рассчитана в произвольной точке пространства \mathbf{x} через ее значения A^b в центрах частиц по следующей интерполяционной формуле:

$$A(\mathbf{x}) = \sum_b \frac{m^b}{\rho^b} A^b M(\mathbf{x} - \mathbf{x}^b, h), \quad (2.31)$$

где m^b и ρ^b – масса и массовая плотность b -й частицы. Суммирование в уравнении (2.31) формально проводится для всех частиц, но из-за свойств функции ядра, уравнения (2.30), только ближайšie соседи дают ненулевой вклад в сумму. Чтобы обеспечить обращение градиента от постоянного поля в нуль, вводится следующий вид пространственных производных в положении центра a -й частицы [80]:

$$(\nabla \cdot A)^a = \sum_b \frac{m^b}{\rho^b} (A^b - A^a) (\mathbf{x}^a - \mathbf{x}^b) f(q, h), \quad (2.32)$$

где функция $f(q, h)$ получается дифференцированием ядра по q :

$$f(q, h) = \frac{3}{4\pi h^5 q} \begin{cases} 3q^2 - 4q, & \text{for } 0 \leq q \leq 1, \\ -(2-q)^2, & \text{for } 1 < q \leq 2, \\ 0, & \text{for } q > 2. \end{cases} \quad (2.33)$$

Используя этот подход, можно записать следующие аппроксимации законов сохранения массы и импульса, уравнения (2.1) и (2.2):

$$\frac{d\rho^a}{dt} = -\sum_b m^b \left((\mathbf{v}^a - \mathbf{v}^b) \cdot (\mathbf{x}^a - \mathbf{x}^b) \right) f(q, h), \quad (2.34)$$

$$\frac{d\mathbf{v}^a}{dt} = \sum_b m^b \left(\left(\frac{\boldsymbol{\sigma}^a + \boldsymbol{\sigma}^b}{\rho^a \rho^b} - \Theta^{ab} \mathbf{I} \right) \cdot (\mathbf{x}^a - \mathbf{x}^b) \right) f(q, h), \quad (2.35)$$

где сумма $\boldsymbol{\sigma}^a + \boldsymbol{\sigma}^b$ в уравнении (2.35) используется для обеспечения сохранения как углового, так и линейного количества движения [80,81], так как делает симметричной силу, действующую на a -ю частицу со стороны b -той и противоположной силы, который действует на b -ю частицу со стороны a -й. Значение Θ^{ab} представляет собой искусственную вязкость, обеспечивающую устойчивость численного решения вблизи фронтов ударных волн. Следуя [81], используем комбинированную искусственную вязкость, включающую как линейную, так и квадратичную:

$$\Theta^{ab} = \frac{\theta^{ab}}{\rho^a + \rho^b} \left((c_s^a + c_s^b) + 4\theta^{ab} \right), \quad (2.36)$$

где $c_s = \sqrt{K/\rho}$ – объемная скорость звука; величина θ^{ab} с размерностью скорости равна нулю для пары частиц, удаляющихся друг от друга, и положительна для частиц, сближающихся друг с другом:

$$\theta^{ab} = \begin{cases} -h \frac{((\mathbf{v}^a - \mathbf{v}^b) \cdot (\mathbf{x}^a - \mathbf{x}^b))}{|\mathbf{x}^a - \mathbf{x}^b|^2 + 0.01h^2}, & \text{for } ((\mathbf{v}^a - \mathbf{v}^b) \cdot (\mathbf{x}^a - \mathbf{x}^b)) < 0, \\ 0, & \text{for } ((\mathbf{v}^a - \mathbf{v}^b) \cdot (\mathbf{x}^a - \mathbf{x}^b)) \geq 0. \end{cases} \quad (2.37)$$

Численная схема для уравнения внутренней энергии (2.3) принимается для обеспечения сохранения энергии в паре с уравнением (2.35):

$$\frac{dE^a}{dt} = \frac{1}{2} \sum_b m^b \left(\frac{P^a + P^b}{\rho^a \rho^b} + \Theta^{ab} \right) \cdot ((\mathbf{v}^a - \mathbf{v}^b) \cdot (\mathbf{x}^a - \mathbf{x}^b)) f(q, h) + (1 - \eta) \frac{(\mathbf{S}^a : \dot{\mathbf{w}}^a)}{\rho^a}. \quad (2.38)$$

В [115] показано, что использование физической вязкости вместо искусственной может обеспечить устойчивое численное решение на достаточно мелкой численной сетке. Этот подход также дает правильное описание неоднородных распределений температуры в виде высокоэнтропийных и низкоэнтропийных слоев в переходных областях образования и отражения ударных волн. С другой стороны, трудно обеспечить требуемое разрешение сетки в случае 3D; поэтому используем искусственную вязкость в уравнениях (2.35) и (2.37).

В случае упругопластической среды необходимо вычислить градиент скорости $(\nabla \otimes \mathbf{v})$, который входит в уравнение (2.5) для тензора макроскопических деформаций и в уравнение (2.6) для тензора вращения:

$$(\nabla \otimes \mathbf{v})^a = \sum_b \frac{m^b}{\rho^b} (\mathbf{x}^a - \mathbf{x}^b) \otimes (\mathbf{v}^b - \mathbf{v}^a) f(q, h). \quad (2.39)$$

Все остальные уравнения модели дислокационной пластичности являются локальными. Они описывают процессы в каждой частице отдельно и не содержат пространственных производных. Интегрирование по времени всех уравнений осуществляется по явной схеме Эйлера с шагом по времени, определяемым из условия Куранта–Фридрихса–Леви:

$$\Delta t = 0.01 \cdot \min_a \{h/c_s^a\}. \quad (2.40)$$

Численное решение в однопоточном режиме реализовано в виде программы SPHER на Фортране (SPH для упругопластических течений). Время вычисления сумм по частицам в наибольшей степени определяет быстродействие алгоритма. При суммировании учитываются только ближайшие частицы с безразмерным расстоянием меньше 2, так как более удаленные частицы дают нулевой вклад в градиенты. Для быстрого поиска соседних частиц расчетная область разбивается на прямоугольники со сторонами не менее $2h$. Только частицы в 27 ($3 \times 3 \times 3$) прямоугольниках, ближайших к текущей частице, включая тот, в котором она находится, проверяются на выполнение условия $|\mathbf{x}^a - \mathbf{x}^b| \leq 2h$. Такой алгоритм построения списка соседей является быстрым и эффективным.

Частицы SPH изначально размещаются в узлах ОЦК-решетки. Это не относится к кристаллической структуре материала, а используется только для расположения частиц SPH как дискретных представителей среды. Расположение ОЦК обеспечивает лучший результат, включая лучшие связи между частицами SPH, чем простое кубическое расположение. Линейный масштаб сглаживания выбирается в два раза больше начального расстояния между частицами по ребрам куба.

Трехмерные численные модели образцов, используемых в тестах Тейлора, представлены на рис. 2.3. Для визуализации полученных результатов использовалась программа OVITO [137]. Количество частиц SPH было определено из предварительных параметрических исследований, чтобы был баланс между точностью и временем расчета. На всех поверхностях ударника задавались свободные граничные условия, кроме контакта с наковальней, на которой задаются условия непроницаемости и свободного скольжения. Всем частицам SPH придается одинаковая начальная скорость по направлению к наковальне.

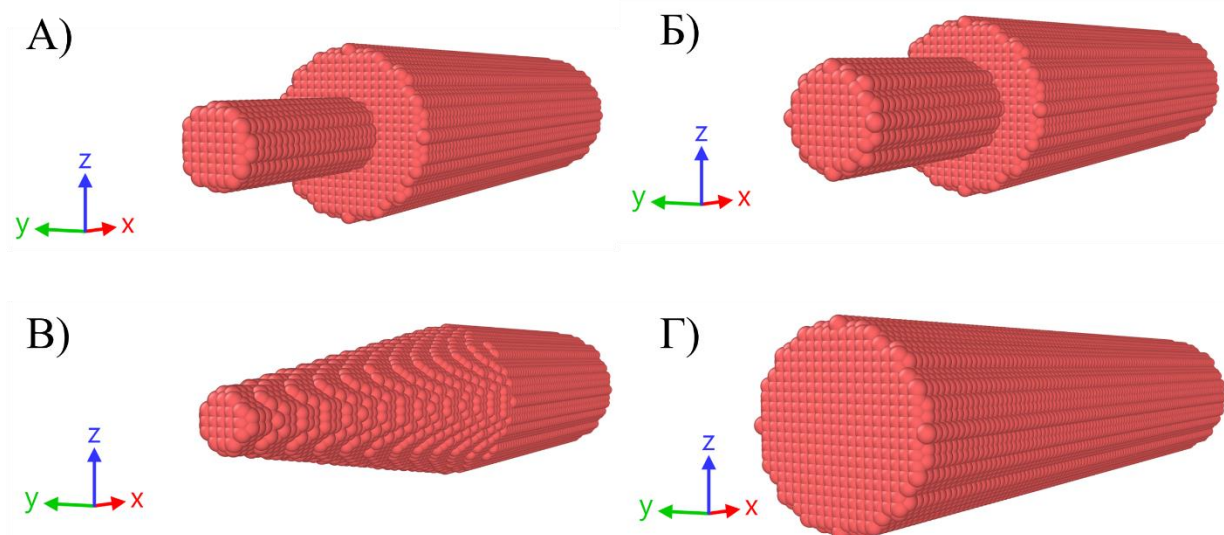


Рис. 2.3. Форма образцов до деформации в численном эксперименте. а) уменьшенный цилиндр диаметром 3 мм, количество частиц SPH около 50 000; б) уменьшенный цилиндр диаметром 4 мм, количество частиц SPH около 51 000; в) конус с диаметром головной части 2 мм, количество частиц СПГ около 45 000; г) Цилиндр диаметром 8 мм, количество частиц SPH составляет около 63 000.

На рис. 2.4. представлены результаты исследования влияния количества SPH частиц в численных моделях на рассчитанное изменение диаметра головной части образца после соударения для случаев уменьшенного 3-мм цилиндра и усеченного конуса. Эти формы показательны, так как содержат наименьшее количество SPH частиц, особенно в головной части, по сравнению с другими формами выборки, что может повлиять на точность вычислений. Как показано на рис. 2.3, увеличение или уменьшение количества частиц не оказывает существенного влияния на изменение диаметра в численном эксперименте. Средние значения изменяются немонотонно в зависимости от числа SPH частиц, и это изменение находится в пределах ошибок. Диапазоны погрешностей, показанные на рис. 2.4., являются следствием отсутствия точной осевой симметрии в численной модели, что приводит к различному изменению диаметра на разных продольных сечениях. Выбрано оптимальное значение

плотности SPH частиц, около 50 000 частиц на образец (рис. 2.3), что позволяет дать достаточно детальное описание формы образца вместе с приемлемым временем расчетов. Дальнейшее увеличение числа частиц увеличивает время расчета, а точность остается прежней.

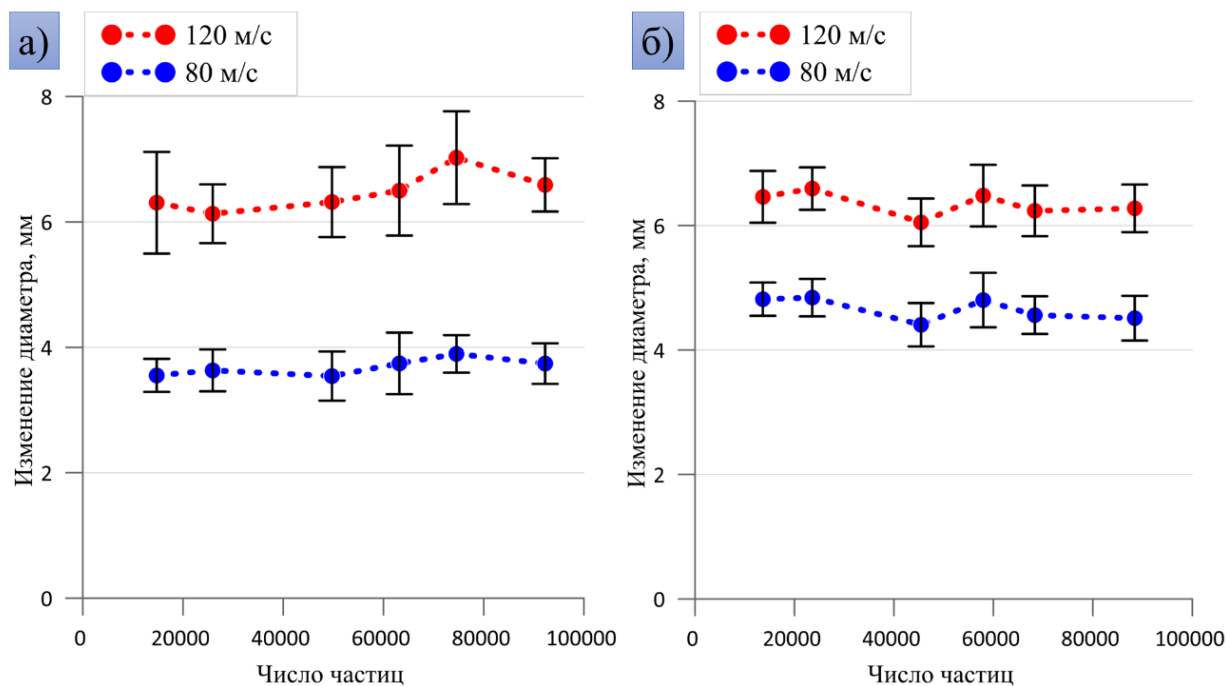


Рисунок 2.4. Влияние количества SPH частиц на изменение диаметра головной части снаряда для случая (а) 3 мм уменьшенного цилиндра и (б) усеченного конуса. Синим цветом показана кривая при скорости удара 80 м/с, красным – 120 м/с.

2.5. Тестирование трехмерной модели

Для проверки корректности работы численной схемы и кода было проведено тестирование программы на задачах об упругом и пластическом соударении шаров, а также одноосном упругом растяжении стержня. Адекватное описание упругих деформаций подтверждает правильность работы модели и кода программы, что позволяет переходить к упругопластическим деформациям.

2.5.1. Упругое и пластическое соударение шаров

Первый тест является задачей об упругом столкновении шаров. Численная модель состоит из двух шаров радиусом 15 мм. Каждый шар разбит на 53 377 SPH частиц, общее число частиц в системе 106 754. Шарам задаются равные по модулю (10 м/с), но разные по знаку скорости (рис. 2.5).

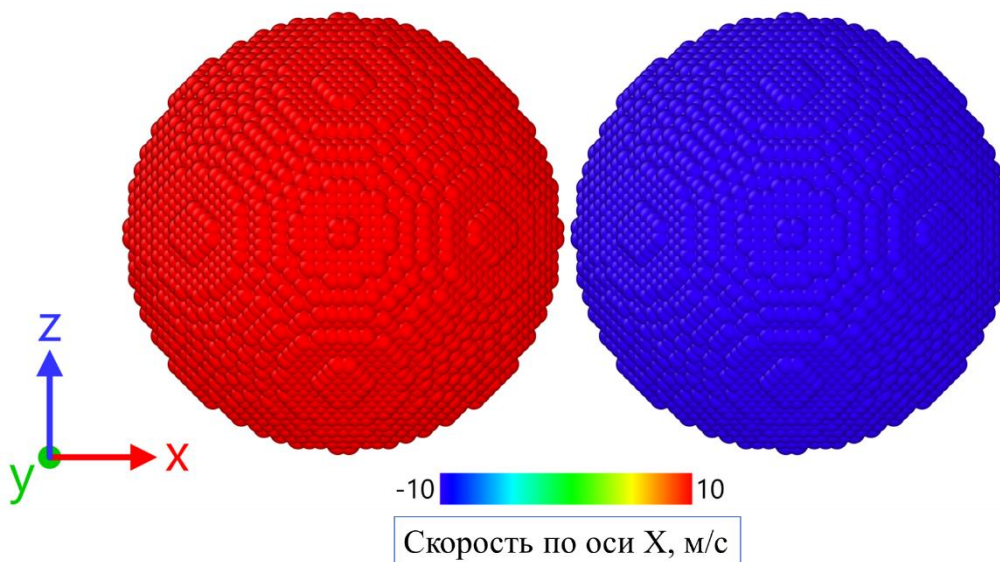


Рис. 2.5. Начальная форма образца и распределение X компоненты скорости (м/с). Пространственная сетка состоит из 106 754 частиц.

На рис. 2.6 показана временная эволюция скоростей каждого из шаров. После начала упругого соударения скорость монотонно изменяется для каждого из шаров, при этом обмен знаками скоростей происходит в момент, когда скорость каждой из сфер равна 0, что свидетельствует о симметричности соударения. После упругого соударения скорость незначительно падает, что связано с выделением тепла при соударении за счет работы искусственной вязкости. Коэффициент восстановления скорости равен 0,993, полная энергия сохраняется с точностью порядка 0.011%.

Сохранение полной энергии системы было проверено и на задаче об упругопластическом соударении. Размеры шаров и количество частиц аналогичны упругой задаче, скорости шаров больше и равны по модулю 100 м/с. полная энергия сохраняется с точностью порядка 0.018%.

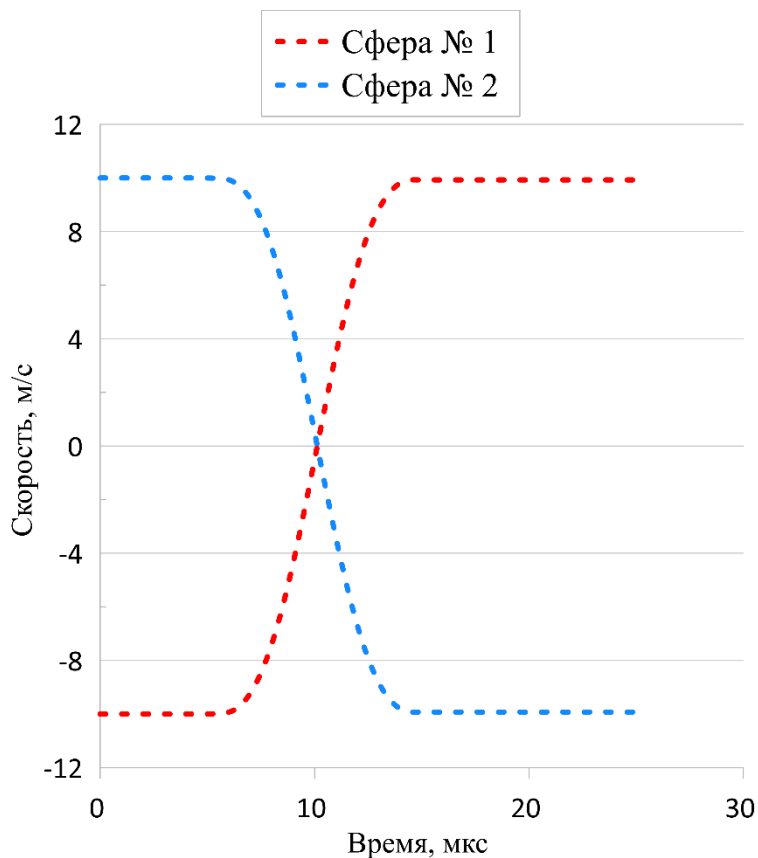


Рис. 2.6. Эволюция средних скоростей шаров при упругом соударении.

2.5.2. Простое упругое растяжение

Для тестирования модели на задаче одноосного упругого растяжения была построена система в виде куба с длиной ребра 4 мм, количество SPH частиц равно 132 651. Куб растягивался по оси Z со скоростью 5 м/с в течении 2,06 микросекунд (рис. 2.7), после чего деформация прекращалась. Задавалось нулевое смещение по оси Z на нижней грани куба и линейно нарастающее по времени смещение по оси Z на верхней грани куба. Боковые поверхности были свободными, также как и задавалось свободное скольжение в направлениях, перпендикулярных Z вдоль нижней и верхней грани куба. Рассчитанные продольные напряжения и поперечные деформации сравнивались с аналитическим решением. Относительное удлинение образца равно 0,25%. Деформация по оси z была рассчитана с помощью уравнения:

$$u_{zz} = \frac{v_z t}{h_0} \quad (2.41)$$

где v_z - скорость растяжения по оси Z , t - время растяжения образца до снятия нагрузки, h_0 - длина образца в начальный момент времени. Деформации по осям x и y были получены с помощью уравнения:

$$u_{xx} = u_{yy} = -u_{zz} \frac{\left(\frac{1}{2G} - \frac{1}{3K}\right)}{\left(\frac{1}{3K} + \frac{1}{G}\right)} \quad (2.42)$$

где G - модуль сдвига, K - модуль всестороннего сжатия. Напряжение по оси растяжения:

$$S_{zz} = \frac{u_{zz}}{\frac{1}{3}\left(\frac{1}{3K} + \frac{1}{G}\right)} \quad (2.43)$$

С помощью выражений (2.41 – 2.43) было получено аналитическое решение, которое сравнивалось с SPH данными как показано на рис. 2.8. Численное решение хорошо коррелирует с аналитическими результатами.

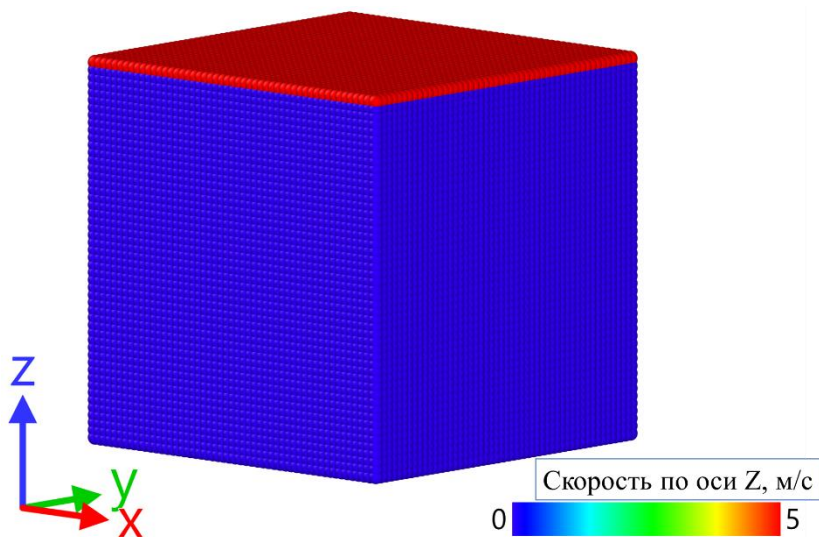


Рис. 2.7. Начальная форма образца и распределение Z компоненты скорости. Численная модель состоит из 132 651 частиц.

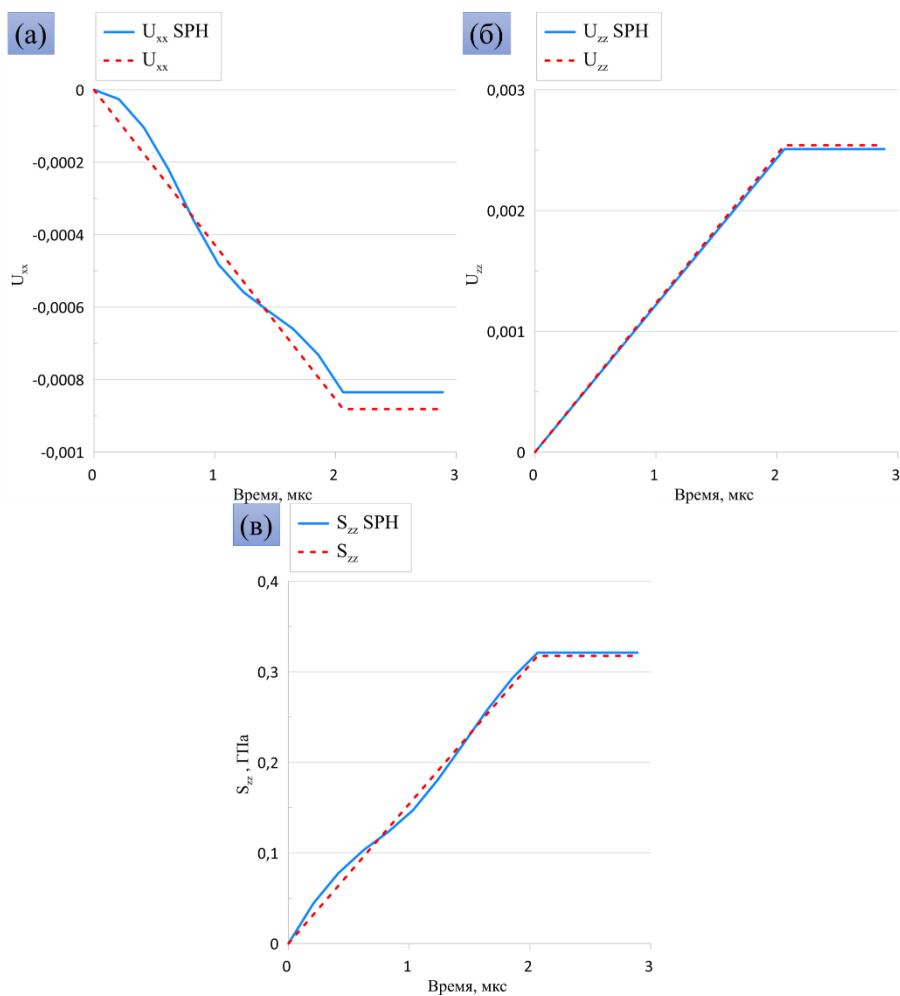


Рис. 2.8. График распределения поперечной деформации относительно оси растяжения (а), продольной деформации (б), продольного напряжения (в) в разные моменты времени. Прерывистая линия является аналитическим решением, сплошная – SPH данные.

Проведенные тесты показывают адекватную реализацию кода SPH, что позволяет далее решать задачи в упругопластической постановке.

Выводы по второй главе

Представлена разработанная в рамках диссертации трехмерная модель динамической деформации металлов с учетом кинетики дислокаций, дополненная моделью измельчения зерна и роста порообразных структур. Описана численная схема метода сглаженных частиц (SPH) и уравнение состояния для меди в виде искусственной нейронной сети. Проведено тестирование модели на задаче об одноосном упругом растяжении и упругом и упругопластическом столкновении шаров.

Основные результаты второй главы:

- 1) Впервые разработана и реализована в виде программы ЭВМ трехмерная теоретической модель упругопластической деформации металлов при высокоскоростном соударении на основе метода сглаженных частиц (SPH) и подхода дислокационной пластичности [59,60], включая подмодель для оценки измельчения зерен и образования порообразных структур на основе представлений о каскаде энергии между уровнями дефектной структуры материала. (Положение № 1 из списка результатов и положений, выносимых на защиту).
- 2) Предложено уравнение состояния в виде искусственной нейронной сети (ИНС), обученное по данным молекулярной динамики для гидростатического сжатия и растяжения репрезентативных объемных элементов меди. ИНС является хорошим выбором для аппроксимации сложных зависимостей без predetermined функциональной формы.
- 3) Исследовано влияние количества SPH частиц на точность расчета параметров образцов после соударения. Увеличение или уменьшение количества частиц не оказывает существенного влияния на изменение диаметра в численном эксперименте. Средние значения изменяются немонотонно в зависимости от числа SPH частиц, и это изменение

находится в пределах ошибок, обусловленных отклонением численной модели от цилиндрической симметрии.

- 4) Проведено тестирование реализующего модель программного кода на задаче об одноосном упругом растяжении и столкновении шаров. Результаты тестирования доказывают корректность реализованной модели, это позволяет решать задачи в упругопластической постановке.

Глава 3. Тесты Тейлора с классическими и профилированными цилиндрами

Во третьей главе приводится описание экспериментальной части работы, включая схему экспериментальной установки, начальные образцы, результаты динамических испытаний и микроструктурный анализ исходных и динамически деформированных образцов с помощью оптической микроскопии. Также предложен приближенный аналитический метод оценки предела текучести и скорости деформации для профилированных образцов с головной частью в виде цилиндра уменьшенного диаметра.

3.1. Экспериментальная установка

Для проведения динамических испытаний используется ударная труба, установленная в лаборатории общей и прикладной физики ЧелГУ, см. рис.3.1. Ударная труба была модифицирована для разгона металлических ударников диаметром до 12 мм, для этого внутри ударной трубы помещается полипропиленовая труба, выдерживающая давления до 10 бар. Длина полипропиленовой трубы 2.1 метр, диаметр 12 мм. Равномерный поток сжатого воздуха из камеры высокого давления в камеру накачки обеспечивается специальной переходной конусообразной манжетой. Максимальное давление в камере накачки составляет 10 бар, а регулировка давления позволяет контролировать скорость ударника. Давление в рабочей части ударной трубы понижается до 0.05 бар с помощью вакуумного насоса, что позволяет увеличить скорость соударения образца с преградой. В качестве мембраны, отделяющей камеру накачки и рабочую часть ударной трубы, используется полипропиленовая лента (скотч), сложенная в несколько слоев. На конце ударной трубы установлена полированная наковальня из хромированной стали. Для предотвращения протекания сжатого газа в область перед образцом мы помещаем ударник в мягкую резиновую или

силиконовую оболочку. Образец и оболочка смазываются силиконовой смазкой WD-40, что позволяет уменьшить трение при разгоне ударника и достичь больших скоростей соударения.

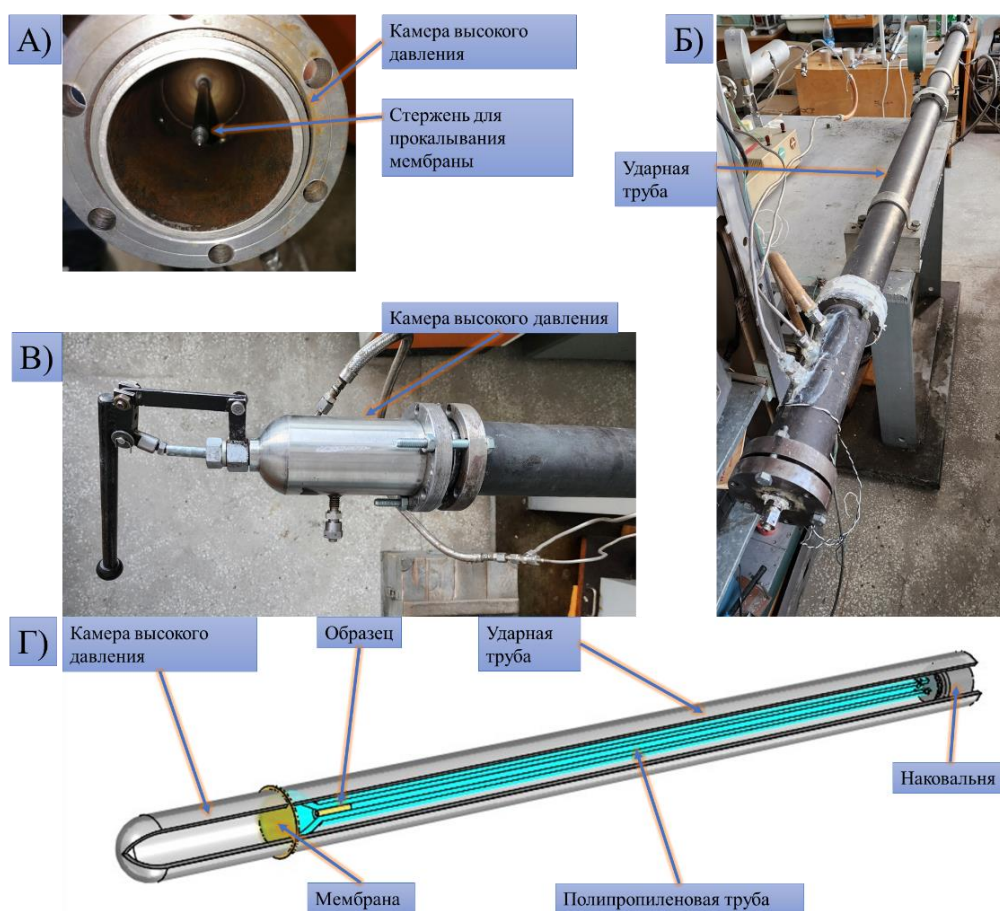


Рис. 3.1. Фотография и схематическое изображение ударной трубы, модифицированной для проведения динамических испытаний; (а) – камера высокого давления, вид изнутри; (б) – ударная труба в сборе; (в) – камера высокого давления; (г) – схематическое изображение ударной трубы в сборе.

Для измерения скорости образца перед соударением используется времяпролетный метод. Время пролета измеряется как временной сдвиг между моментами изменения напряжения на каналах А и В осциллографа Nantek DSO 4102С. На каждый из каналов подается напряжение 16 В. Для замыкания цепи используются тонкие металлические нити (припой), помещенные внутрь полипропиленовой трубы; отверстия расположены на расстоянии 50 мм друг от друга. Эти металлические нити подключены к

каналам А и В осциллографа соответственно. Во время полета снаряд рвет металлические нити, размыкает электрическую цепь и вызывает падение напряжения на осциллографе. Система предварительно тестировалась на измерении скорости свободно падающего тела и показывала меньшее отклонение от ожидаемого результата.

3.1.1. Образцы для проведения динамических испытаний

В качестве исследуемого материала для динамических испытаний используется бескислородная холоднокатанная медь марки М1Т, отожженная при 900 °С в течении двух часов холоднокатанная медь, латунь марки ЛС 59-1 ПТ (полутвердая) и дюралюминий Д16Т. Медь, латунь и дюралюминий широко используются в конструкциях и машинах, которые могут подвергаться динамическим нагрузкам, начиная от электромобилей и заканчивая ракетами и снарядами. Металлы в необработанном виде представляет собой холоднокатанные прутки диаметром 8 мм. Прутки для классических испытаний были нарезаны длиной по 40 мм каждый. Для повышения напряжений на ударной поверхности образца в условия ограниченности скоростей удара, а также для повышения вариативности обучающих данных предлагается модификация классических 8 мм цилиндров. Прутки были обработаны в головной части для получения следующих форм: 1) уменьшенный цилиндр диаметром 3 мм и длиной 10 мм; 2) аналогичный цилиндр диаметром 4 мм; 3) усеченный конус с длиной обработанной части 20 мм и диаметром головной части 2 мм. Фотографии недеформированных модифицированных ударников показаны на рис. 3.2. Масса медных образцов варьируется в диапазоне 14-20 грамм в зависимости от формы образца, латунных образцов 12-18 грамм, а дюралюминиевых от 3 до 6 грамм. Образцы сталкивались с жесткой преградой со скоростями соударения до 125 м/с в случае медных и латунных образцов и до 212 м/с в случае дюралюминиевых образцов.

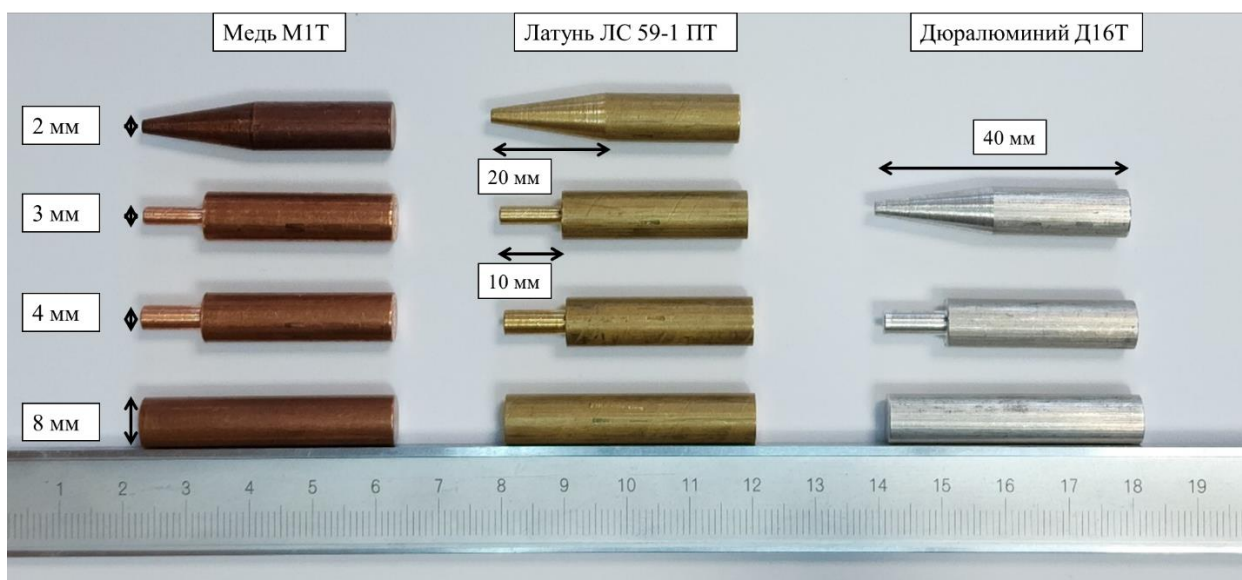


Рис. 3.2. Фотография недеформированных классических и модифицированных ударников для проведения динамических испытаний.

3.2. Результаты динамических испытаний

В экспериментах регистрируется только финальная форма образцов после соударения. Несмотря на то, что большинство современных экспериментальных установок для испытания на удар по Тейлору оснащены высокоскоростными камерами, сравнение конечной формы между экспериментом и моделированием остается широко используемой методикой.

3.2.1. Ударники из твердой меди

На рис. 3.3. показана финальная форма деформированных образцов из твердой холоднокатанной меди в сравнении с эталонным образцом для трех рассмотренных профилей головной части. Некоторые деформированные образцы не показаны на рис. 3.3., поскольку они были выбраны для микроструктурного анализа. В случае цилиндрической головной части, показанной на рис. 3.3.(б, в), основной тенденцией деформации является укорочение головной части. Степень укорочения монотонно возрастает с увеличением скорости удара. Меньший диаметр головной части приводит к

более сильному укорочению при той же скорости удара. Радиальное расширение близко к равномерному вдоль головной части. Радиальная истинная деформация, рассчитанная по диаметру головной части, достигает около 0,7 для головной части 4 мм и около 1 для головной части 3 мм при максимальных скоростях удара в эксперименте. Основная часть цилиндра остается практически недеформированной вплоть до скоростей удара около 100 м/с. Эта часть цилиндра работает как молоток, ударяющий и сжимающий головную часть образцов. Для опытов с уменьшенным цилиндром при высокой скорости удара более 100 м/с можно наблюдать деформацию хвостовой части цилиндра (образцы № 11-14 для 4-мм уменьшенного цилиндра и образцы № 4 и 5 для 3-мм уменьшенного цилиндра) на рис. 3.3.(б, в).

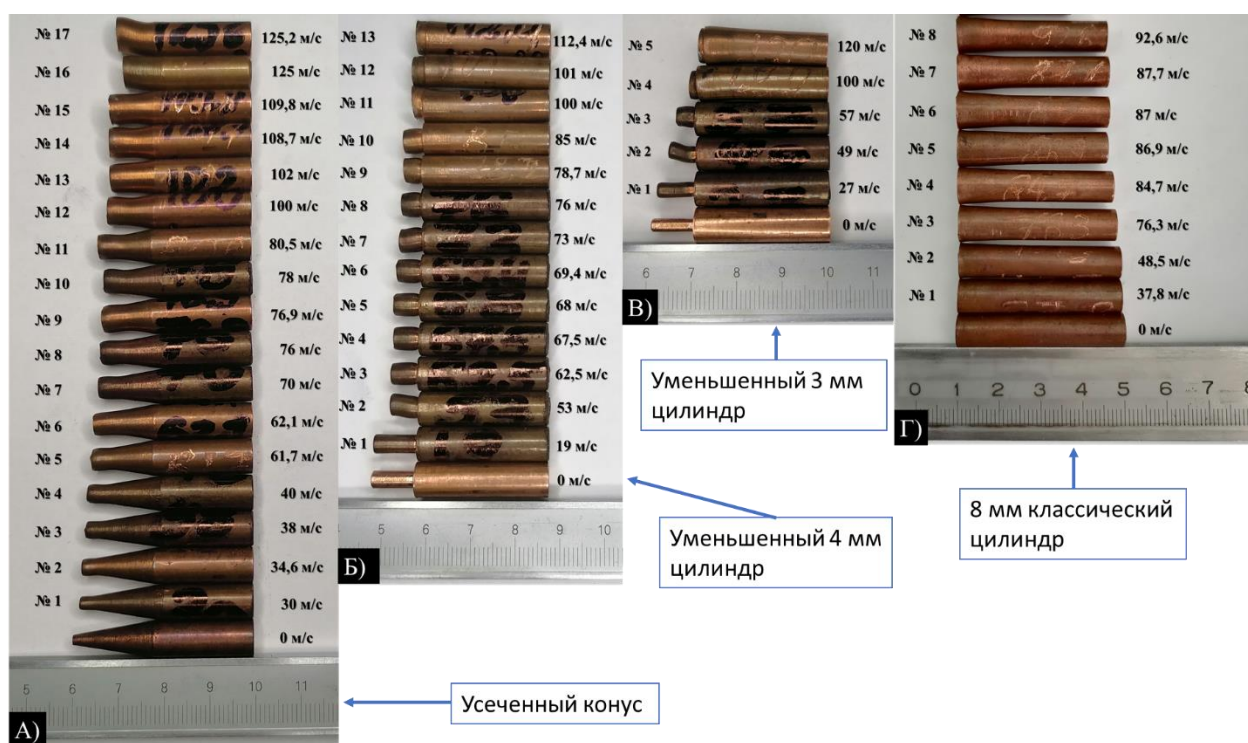


Рисунок 3.3. Фотографии медных образцов после динамических испытаний; (а) – усеченный конус; (б) – уменьшенный 4 мм цилиндр; (в) – уменьшенный 3 мм цилиндр; (г) – классический 8 мм цилиндр.

В случае конической головной части, рис. 3.3(а), деформация существенно неравномерна вдоль оси, что характерно для классических испытаний Тейлора. В отличие от «грибовидности» классических цилиндрических образцов повышенная деформация на конце конуса приводит к некоторому выравниванию диаметра деформируемого образца вблизи ударной кромки. Максимальная радиальная истинная деформация на конце конуса достигает примерно 1,3 при скорости удара более 100 м/с. Укорочение конусообразной головной части видно и на рис. 3.3.(а).

В случае классического цилиндрического ударника, рис 3.3(г) удар о наковальню вызывает сплющивание вблизи ударной поверхности цилиндрических образцов: чем выше скорость удара, тем сильнее сплющивание образца.

3.2.2. Медные отожженные ударники

Процедура отжига позволяет увеличить пластичность металлов, тем самым препятствуя его разрушению при динамических нагрузках. Также при высокотемпературном отжиге снимаются механические напряжения в металле, делая его еще более пластичным, но менее пригодным для механической обработки. Сравнение динамически деформированных отожженных образцов с холоднокатанной медью, дополненное микроструктурным анализом, позволяет показать влияние разных структурных состояниях одного и того же металла на процесс пластической деформации. Для этого холоднодеформированная медь марки М1Т была отожжена в муфельной печи при температуре 900 °С в течении 2 часов, образцы охлаждались вместе с муфельной печью естественным образом, т.н. полный отжиг. Так как муфельная печь взаимодействует с кислородом, на поверхности медных образцов после отжига появляется окалина характерного черного цвета, которая легко удаляется с поверхности металла. Стоит отметить, что отожженные образцы в среднем меньше по длине и

диаметру на 0,5 мм в сравнении с холоднокатанной медью, т.е. верхний слой металла остается на окалине. Результаты динамических испытаний показаны на рис. 3.4.

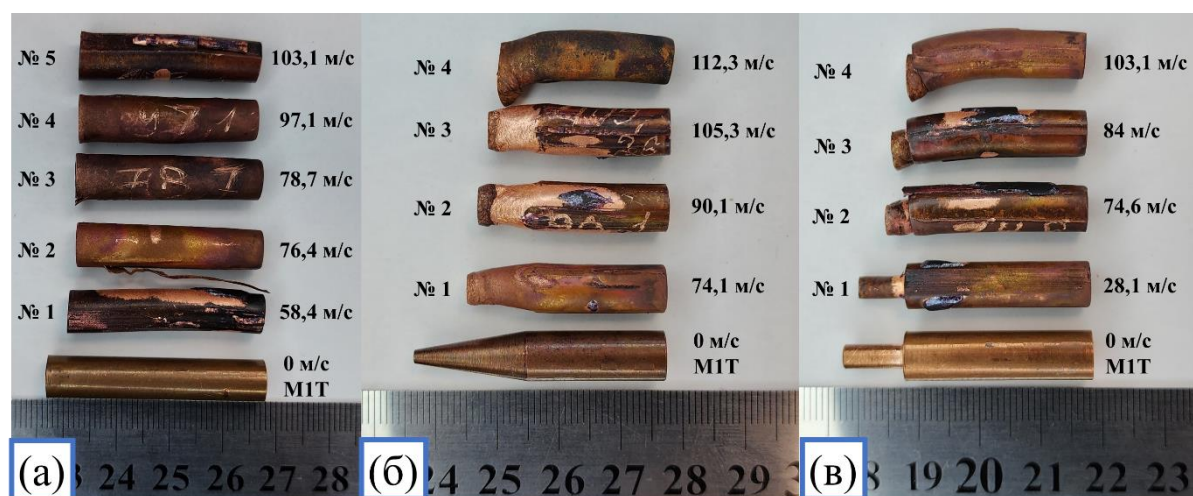


Рисунок 3.4. Фотографии медных образцов после динамических испытаний; (а) – классический 8 мм цилиндр; (б) – усеченный конус; (в) – уменьшенный 4 мм цилиндр.

В случае классического 8 мм цилиндра (рис. 3.4 (а)) на аналогичных скоростях соударения с образцами из холоднокатанной меди наблюдается большее сокращение длины образца. Диаметр образца меняется практически по всей длине образца, при этом изменение диаметра вблизи ударной поверхности меньше по сравнению с твердыми медными ударниками. Такой характер деформации свойственен для мягкой меди, в которой размер зерна существенно увеличен по сравнению с холоднокатанными образцами (см. раздел 3.3.1). Аналогичный характер деформации свойственен для образцов с конической (рис. 3.4 (б)) и профилированной (рис. 3.4 (в)) головной частью. Деформация не профилированной части достигается на меньших скоростях, что еще раз подтверждает увеличившуюся пластичность материала после процедуры отжига. При этом ударная поверхность большинства испытанных профилированных ударников неравномерна по своей форме деформации, как показано на рисунке 4.23. В холоднокатанных образцах подобная тенденция менее выражена. Это можно объяснить существенно увеличившимся

размером зеренной структуры отожженных образцов, что из-за анизотропии отдельных зерен приводит к неоднородности свойств материала на пространственных масштабах, сравнимых с головной частью образца.

3.2.3. Латунные ударники

На рис. 3.5. показаны классические и уменьшенные 4 мм цилиндры из латуни марки ЛС 59-1 ПТ, подвергшиеся пластической деформации при высокоскоростном соударении, при этом разрушение образцов не наблюдается. На рисунке 3.6. и 3.7. показаны разрушенные образцы для случая с уменьшенной 4 мм цилиндром и усеченным конусом, соответственно.

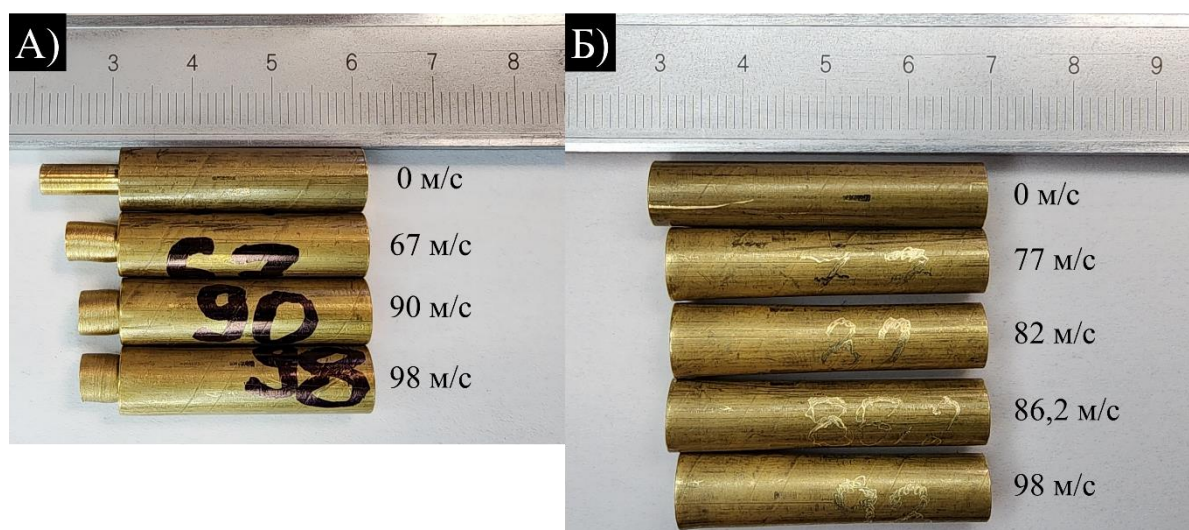


Рис. 3.5. Результаты экспериментов: финальная форма при различных скоростях удара по сравнению с начальной формой.

Как видно, для случая 4 мм уменьшенного цилиндра примерно до скорости соударения около 100 м/с характерна пластическая деформация без разрушения. При достижении скорости соударения около 100 м/с или более наблюдается разрушение головной части ударника. При этом на рисунке 3.6. (а) видно, что разрушается только головная часть образца, а при увеличении скорости соударения (рис. 3.7 (б-в)) образуется большое количество мелких

осколков, появившихся вследствие последовательного разрушения головной части ударника.



Рис. 3.6. Результаты экспериментов: Финальная форма разрушенных образцов и осколки при различных скоростях удара для 4-мм цилиндров.

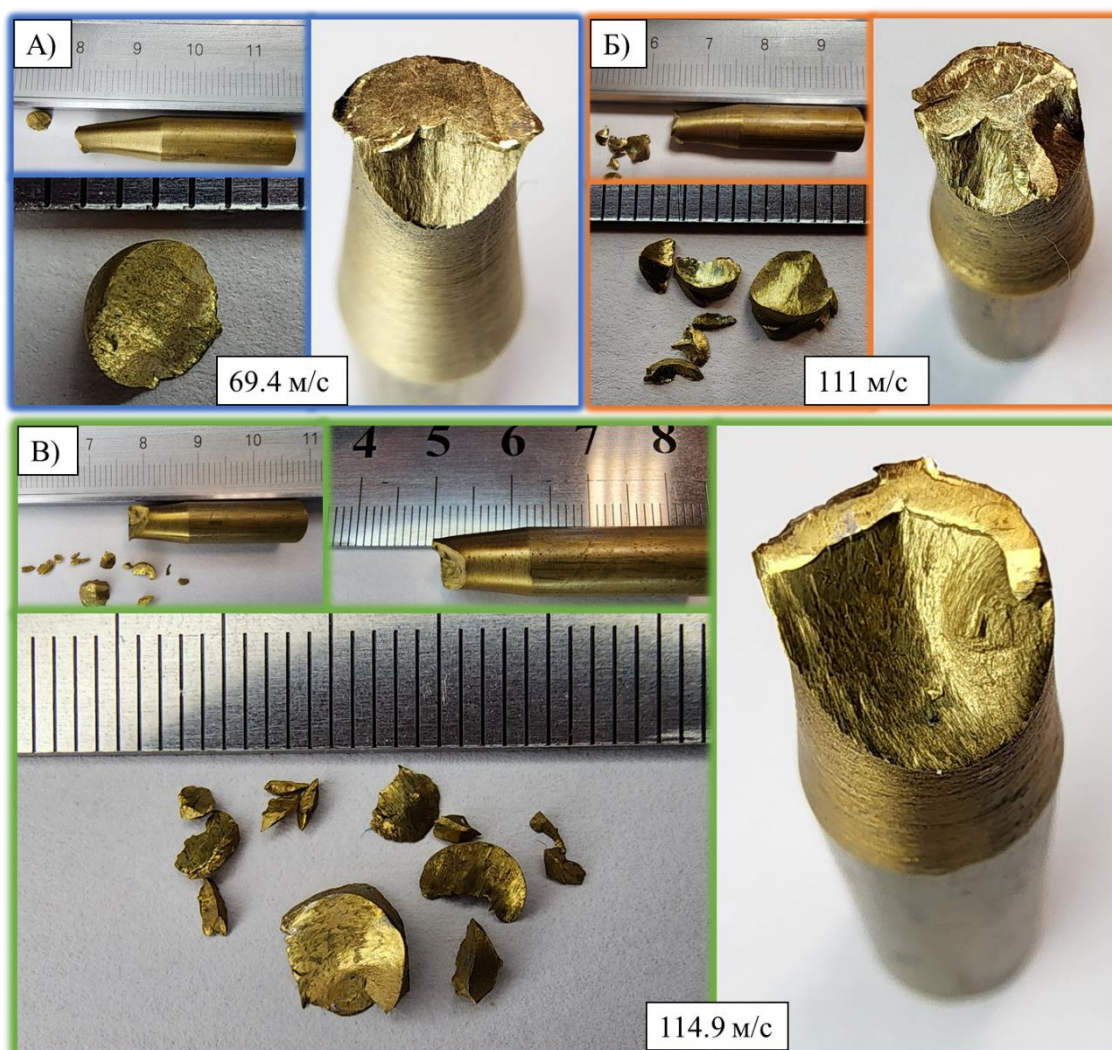


Рис. 3.7. Результаты экспериментов: финальная форма разрушенных образцов при различных скоростях удара для случая конических ударников.

В случае усеченного конуса наблюдается разрушение даже при небольших скоростях соударения (рис. 3.7.(а)) по сравнению со случаем уменьшенного 4 мм цилиндра. Это можно объяснить уменьшенным диаметров головной части ударника – 2 мм, что приводит к более высоким напряжениям при соударении с наковальней. На рис. 3.7. хорошо прослеживается эволюция разрушения и образования мелких фрагментов латуни с увеличением скорости соударения. Таблица 3.1 содержит данные о пластически деформированных и разрушенных образцах, в случае разрушения приведено количество фрагментов образца.

Таблица 3.1. Данные о разрушенных латунных ударниках и количестве образовавшихся фрагментов.

Скорость удара, м/с	Разрушение образца	Количество фрагментов	Количество фрагментов
		<i>меньше</i> 1 миллиметра	<i>больше</i> 1 миллиметра
Уменьшенный 4 мм цилиндр			
67	-	-	-
90	-	-	-
97	+	1	1
98	-	-	-
100	+	2	0
104.2	+	7	6
108.7	+	7	2
115	+	1	0
133	+	1	0
Усеченный конус			
69	+	2	0
69.4	+	1	0
90.1	-	-	-
101	+	4	3
103	+	2	2
111	+	3	3
114.9	+	8	5

3.2.4. Дюралюминиевые ударники

Для дюралюминия Д16Т была проведена серия экспериментов с вырезанным 4 мм цилиндром в диапазоне скоростей 121,9 – 212,7 м/с и усеченным конусом в диапазоне скоростей 144,9 – 175,4 м/с.

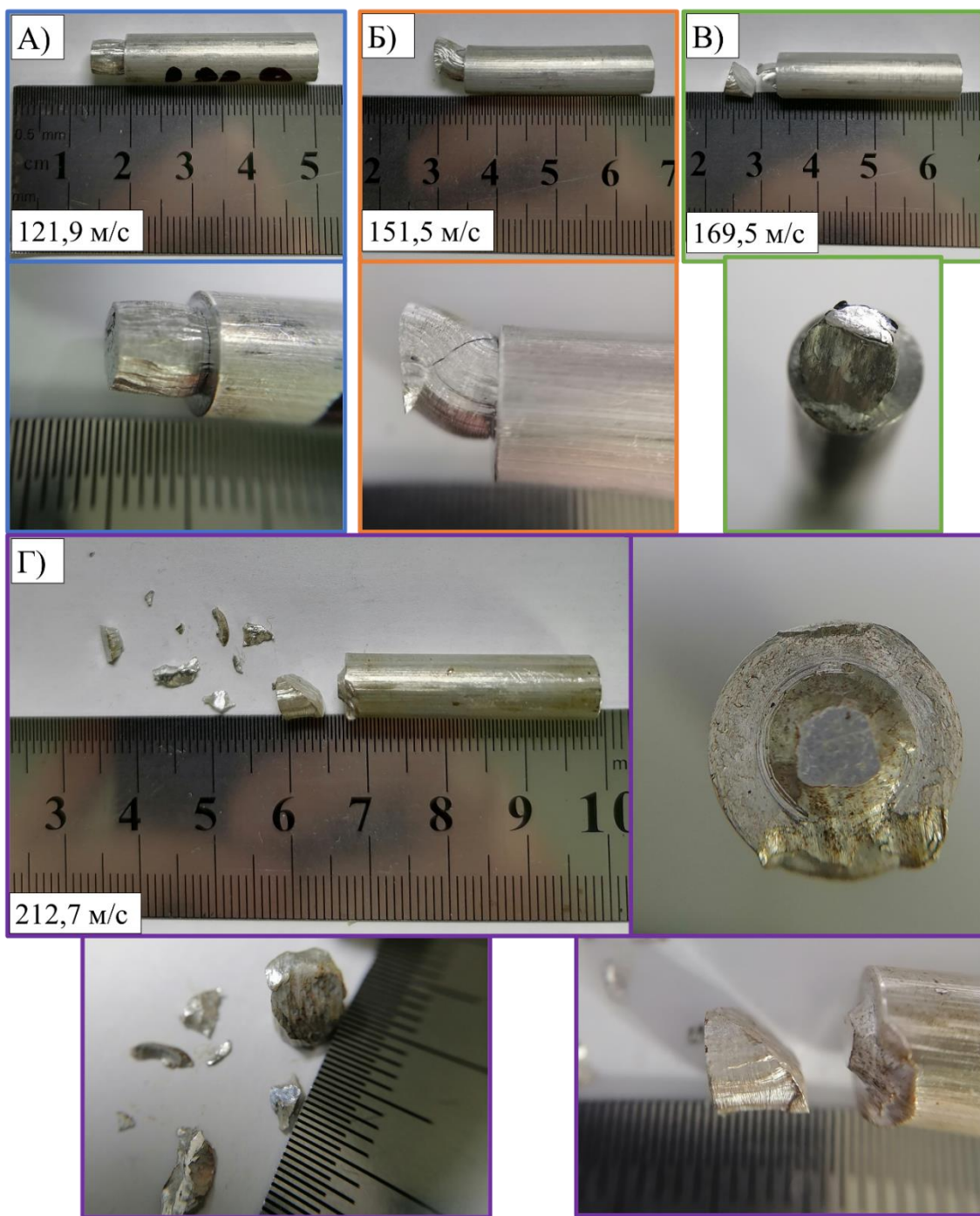


Рис. 3.8. Фотографии уменьшенных 4 мм дюралюминиевых ударников Д16Т после динамических испытаний, (а) – скорость соударения 121,9 м/с, (б) – скорость соударения 151,5 м/с, (в) – скорость соударения 169,5 м/с, (г) – скорость соударения 212,7 м/с.

В случае уменьшенного 4 мм цилиндра для малых скоростей соударения (121,9 м/с) характерно наличие небольших трещин на ударной поверхности и в месте перехода 8 мм цилиндра в вырезанный 4 мм цилиндр

рис. 3.8.(а). При скорости соударения 151,5 рис. 3.8.(б) визуализируется большая трещина, расположенная вдоль ударника под углом примерно 45 градусов по отношению к плоскости соударения. Дальнейшее увеличение скорости соударения приводит к отколу фрагмента вырезанного 4 мм цилиндра рис. 3.8.(в). При скорости соударения 212,7 м/с наблюдается большое количество отколотых фрагментов в результате деформации, рис. 3.8. (в).

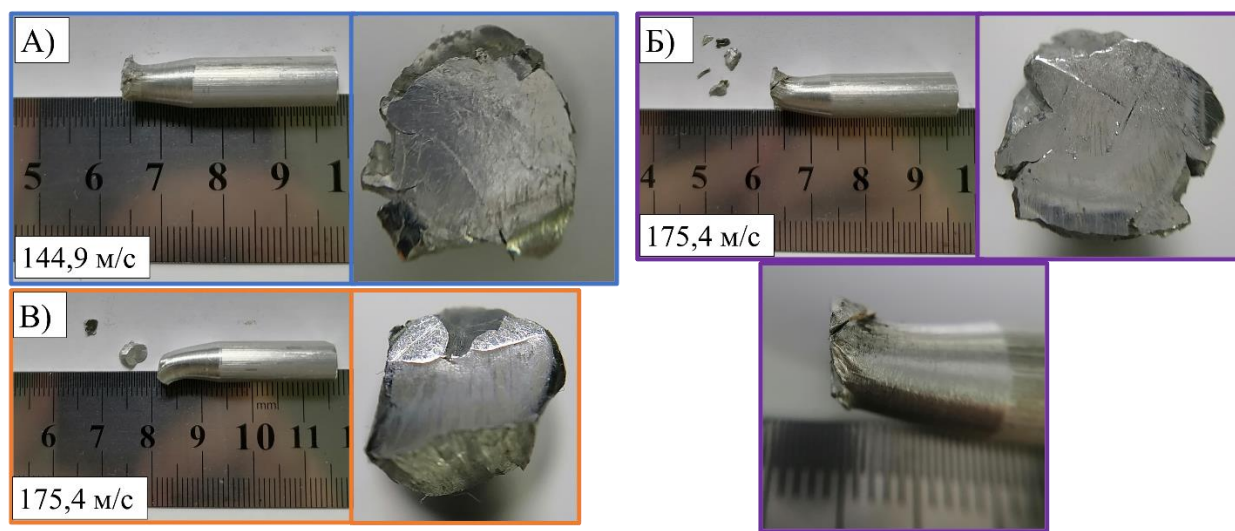


Рис. 3.9. Фотографии конусообразных дюралюминиевых ударников Д16Т после динамических испытаний, (а) – скорость соударения 144,9 м/с, (б) – скорость соударения 175,4 м/с, (в) – скорость соударения 175,4 м/с.

В случае конической головной части на скорости соударения 144,9 м/с наблюдается большое количество трещин на поверхности образца рис. 3.9.(а), при этом отделения фрагментов от образца не происходит. Далее рассмотрим результаты двух экспериментов по соударению конуса с одинаковой скоростью соударения – 175,4 м/с. В первом случае наблюдается откол двух фрагментов от образца рис. 3.9.(в), при этом головная часть загнута относительно продольной оси образца. Во втором случае изгиб головной части образца менее заметен, при этом наблюдается большее количество трещин и отколотых фрагментов рис. 3.9(б). Такое отличие

картины разрушения свидетельствует, скорее всего, о влиянии локальной микроструктуры материала, из которого изготовлены ударники.

3.3. Микроструктурный анализ

Металлографический анализ образцов с помощью оптической микроскопии с максимальным увеличением в 1400 раз проводился для следующих медных образцов: 3-мм уменьшенные цилиндры, подвергнутые удару со скоростью 89,3, 100, 120,5, 122 м/с; 4-мм уменьшенные цилиндры ударялись со скоростью 73 и 120,5 м/с, конус — со скоростью 120,5 м/с, а 8 мм цилиндр со скоростью 86,9 и 113,6 м/с; медных отожженных образцов: недеформированный образец, 8 мм цилиндр, скорость соударения 76,4 м/с; латунных образцов: уменьшенного 4 мм цилиндра, скорость соударения 89,3 м/с; усеченного конуса, скорость соударения 103 м/с. Основной целью было исследование исходной микроструктуры и ее изменение при динамическом деформировании. Известно, что начальная микроструктура материала оказывает существенное влияние на его деформацию и разрушение [138]. Для травления использовали 3% раствор перекиси водорода, лимонной кислоты и соли (хлорида натрия). На рисунке 3.10. показаны медные и латунные образцы до и после травления.

3.3.1. Металлография холоднокатанных медных образцов

Сначала рассмотрим исходные образцы, микроструктура которых возникла в результате квазистатической деформации при холодной прокатке, используемой на этапе изготовления медного прутка. Никаких примесей или оксидов на микрофотографиях не наблюдается. Зерна со средним диаметром около 18 ± 4 мкм вытянуты в направлении прокатки, как показано на рис. 3.11. (а-в). На рис. 3.11.(в) видна сетчатая структура субзерен размером до 3 мкм. Отчетливо видны полосы локализации пластического течения шириной 10-20 мкм. Эти полосы идут по направлению прокатки медного стержня и имеют вид небольших углублений, состоящих в основном из мелких зерен размером

менее 3 мкм, как показано на рис. 3.12. Из литературы известно, что до 90 % вся пластическая деформация материала может быть сосредоточена в полосах сдвига, формирование которых представляет большой интерес [139-143]. Полосы сдвига имеют сложную структуру сильно деформированного материала и содержат структуры дислокаций и нанокристаллических зерен [144-148]. Границы субзерен и полосы сдвига образуют прочные дислокационные структуры с большой плотностью иммобилизованных дислокаций, которые препятствуют скольжению подвижных дислокаций и повышают предел текучести. Оценим плотность дислокаций, создающих границы субзерен, если последние можно рассматривать как стенки дислокаций (малоугловые границы зерен). Если оценить средний диаметр субзерен как $D_{SG} = 3 \mu\text{m}$, удельную площадь границ субзерен можно оценить как половину отношения площади поверхности сферы к объему сферы: $3/D_{SG} = 10^6 \text{ m}^{-1}$. Поверхностная плотность дислокаций в малоугловых границах зерен варьируется примерно от 10^8 m^{-1} до $8 \cdot 10^8 \text{ m}^{-1}$ при увеличении угла разориентации с 2° до 15° [149]. Таким образом, можно оценить скалярную (объемную) плотность образующих эти структуры дислокаций, лежащую в диапазоне от $1 \cdot 10^{14} \text{ m}^{-2}$ до $8 \cdot 10^{14} \text{ m}^{-2}$. Эта оценка не противоречит экспериментальным данным [150], полученным с помощью просвечивающей электронной микроскопии и дающим величину около $1.2 \cdot 10^{14} \text{ m}^{-2}$ с образованием ячеистой структуры при 10 % деформации растяжением ГЦК меди при комнатной температуре. Следует отметить, что подобранное статистическим методом Байеса значение начальной полной плотности дислокаций (сумма по всем системам скольжения) в модели дислокационной пластичности составляет около $0.8 \cdot 10^{14} \text{ m}^{-2}$ (см. раздел 2.1 и табл. 2.1), что имеет тот-же порядок, что и оценки по оптической металлографии и экспериментальные данные [150].

В динамически деформированных образцах наблюдается уменьшение размера зерна с образованием зерен размером менее 1 мкм. Вблизи ударной поверхности обнаруживается ряд порообразных структур диаметром 10-40 мкм, рис. 3.14. (а, б, в), и полос локализации, рис. 3.12., 3.14. (б). Порообразные структуры в исходном материале не наблюдаются и вместе с измельчением зерна являются особенностями дальнейшей эволюции микроструктуры материала в процессе динамического деформирования. Порообразные структуры обозначены бороздками с расфокусированным дном на исследованных поперечных сечениях деформированных частей образцов и, скорее всего, представляют собой ослабленные участки материала, выкрошившегося в процессе травления.

При умеренных скоростях удара (до 100 м/с) и уменьшенных цилиндрических головных частях наблюдаются небольшие трещины вблизи перехода от головной части к основной части ударника, см. рис. 3.12. для случая уменьшенного цилиндра 4 мм. В случае цилиндра диаметром 3 мм при скорости удара 89,3 м/с наблюдаются более крупные трещины, расстояние между вершинами трещин составляет 2,4 мм при исходном диаметре уменьшенной части 3 мм. При увеличении скорости удара 3-мм уменьшенного цилиндра до более чем 100 м/с трещина распространяется по всему переходному диаметру образца, как показано на рис. 3.13. (а, б) и 3.14. (а-в). В случае уменьшенного 4-мм цилиндра при скорости удара 120,5 м/с трещина не распространяется на всю длину переходного диаметра, и расстояние между трещинами остается около 1 мм. Образование трещин не наблюдалось для классических испытаний Тейлора в [5] и является специфической особенностью профилированных образцов.

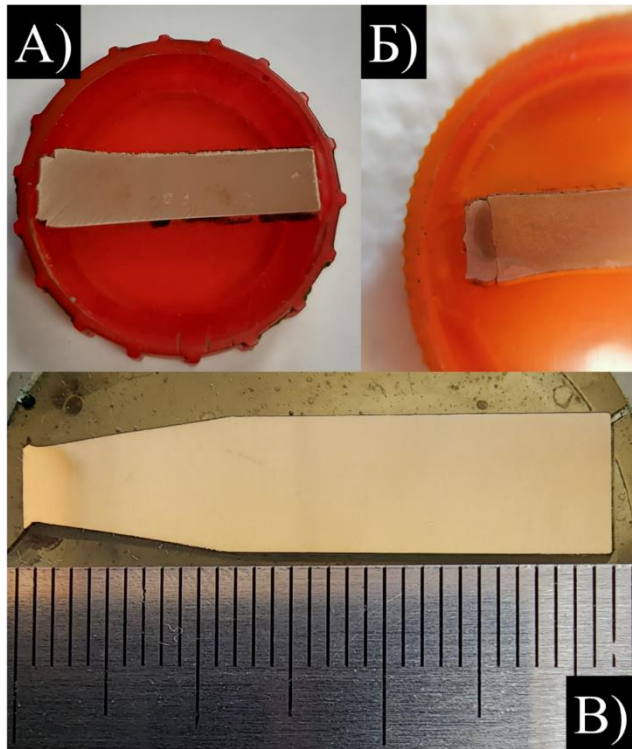


Рис. 3.10. Фотографии микрошлифов образцов; (а) – медный 3 мм уменьшенный цилиндр перед травлением, скорость соударения 122 м/с; (б) – медный 4 мм цилиндр после травления, скорость соударения 120.5 м/с; (в) – латунный усеченный конус после травления, скорость соударения 103 м/с.

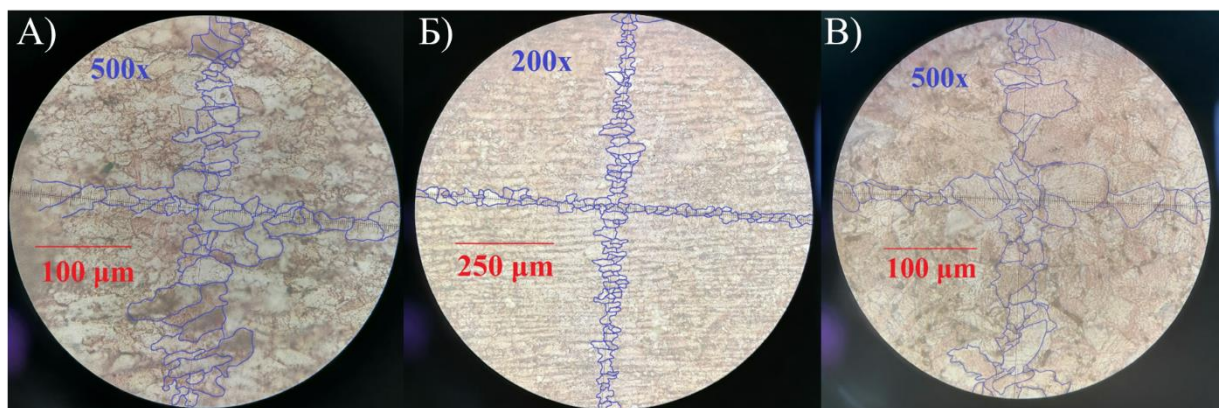


Рис. 3.11. Оптические микрофотографии поперечного сечения исходного образца холоднокатанной меди, полученные с помощью металлографического микроскопа; (а), (б) – зерна выделены для оценки размера; (в) – структура субзерен, размер субзерен менее 3 мкм.

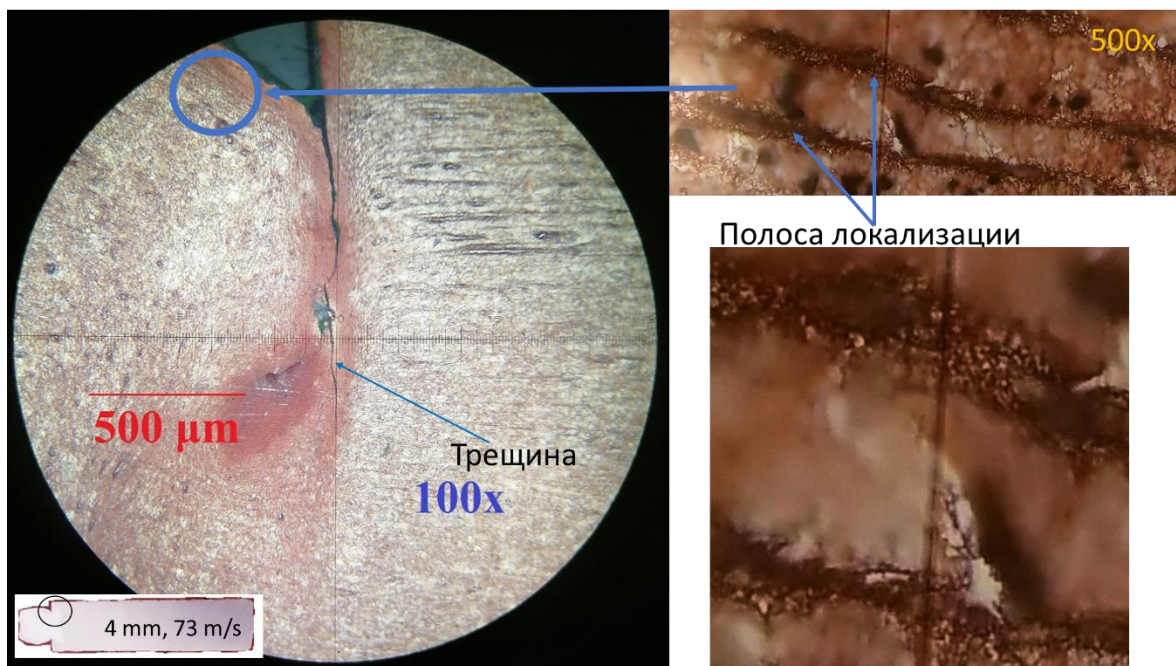


Рис. 3.12. Оптические микрофотографии поперечного сечения деформированного 4-мм уменьшенного образца, подвергнутого удару со скоростью 73 м/с: визуализируются трещины в области переходного диаметра и полосы локализации пластического течения с характерным размером 10-20 мкм.

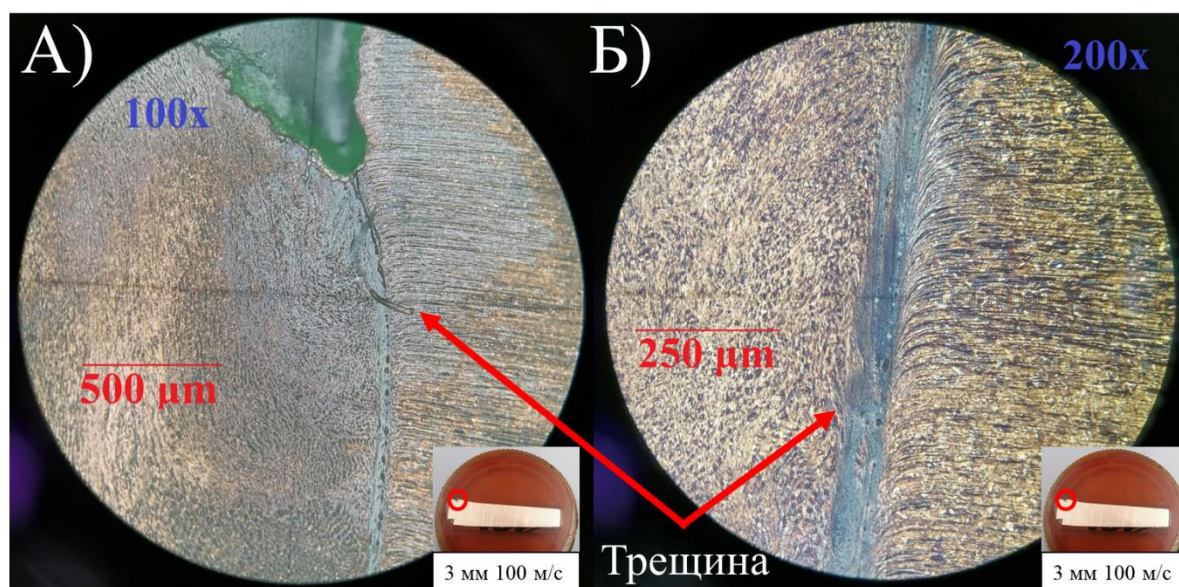


Рис. 3.13. Оптические микрофотографии поперечного сечения деформированного 3-мм уменьшенного образца, подвергнутого удару со скоростью 100 м/с: (а) – участок вблизи диаметра перехода от головной части

(слева) к основной части (справа) с трескаться; (б) – центральная часть переходного диаметра со сквозной трещиной.

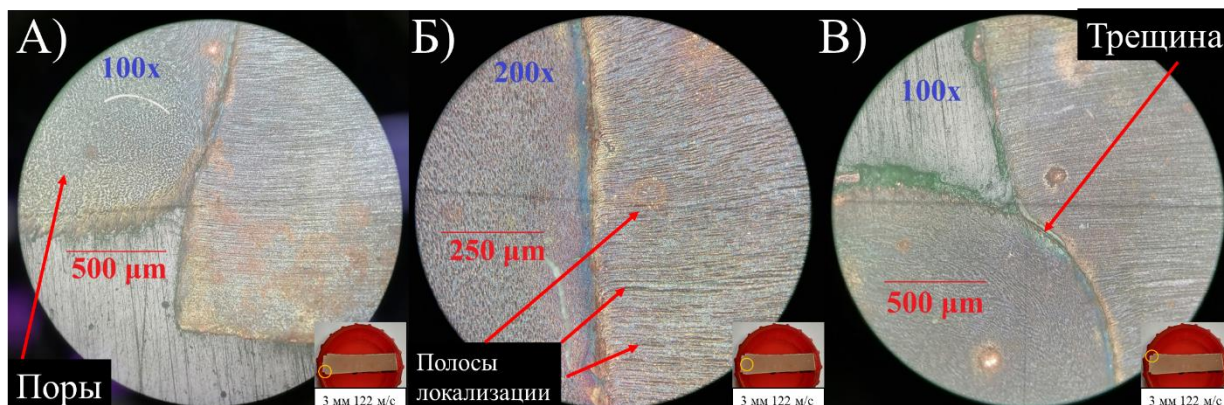


Рис. 3.14. Оптические микрофотографии поперечного сечения деформированного 3-мм уменьшенного образца, подвергнутого удару со скоростью 122 м/с: (а)–(в) деформированной головной части образца визуализируются поры диаметром 10-40 мкм; (б), (в) – поры наблюдаются в области переходного диаметра образца слева от трещины, а полосы локализации – в области справа от трещины.

В случае классического цилиндра в динамически деформированных образцах также наблюдается значительное уменьшение размеров зерен. Вблизи ударной поверхности размер большинства зерен можно оценить сверху как менее 1 мкм, при этом видны и отдельные крупные зерна диаметром около $(16,5 \pm 2,5)$ мкм, что близко к таковому в недеформированном материале. На расстоянии 3 мм от ударной поверхности наблюдаются конгломераты зерен со средним диаметром около (7 ± 2) мкм с субмикронными зернами на границе этих конгломератов. Зерна в этих конгломератах равноосные, в отличие от удлиненных зерен в сырье. Помимо измельчения зерен, обнаруженных вблизи ударной поверхности, был обнаружен ряд порообразных структур диаметром около 15-30 мкм, рис. 3.15. (а, б, г) и полосы локализации, рис. 3.15. (а, б). Если рассматривать структуру образца в областях умеренной пластической деформации (ближе к

середине цилиндра), то можно наблюдать смешанную микроструктуру: Обычные зерна, близкие по размеру к зернам в недеформированном образце с мелкозернистой структурой на границе между более крупными зернами, рис. 3.15.(в).

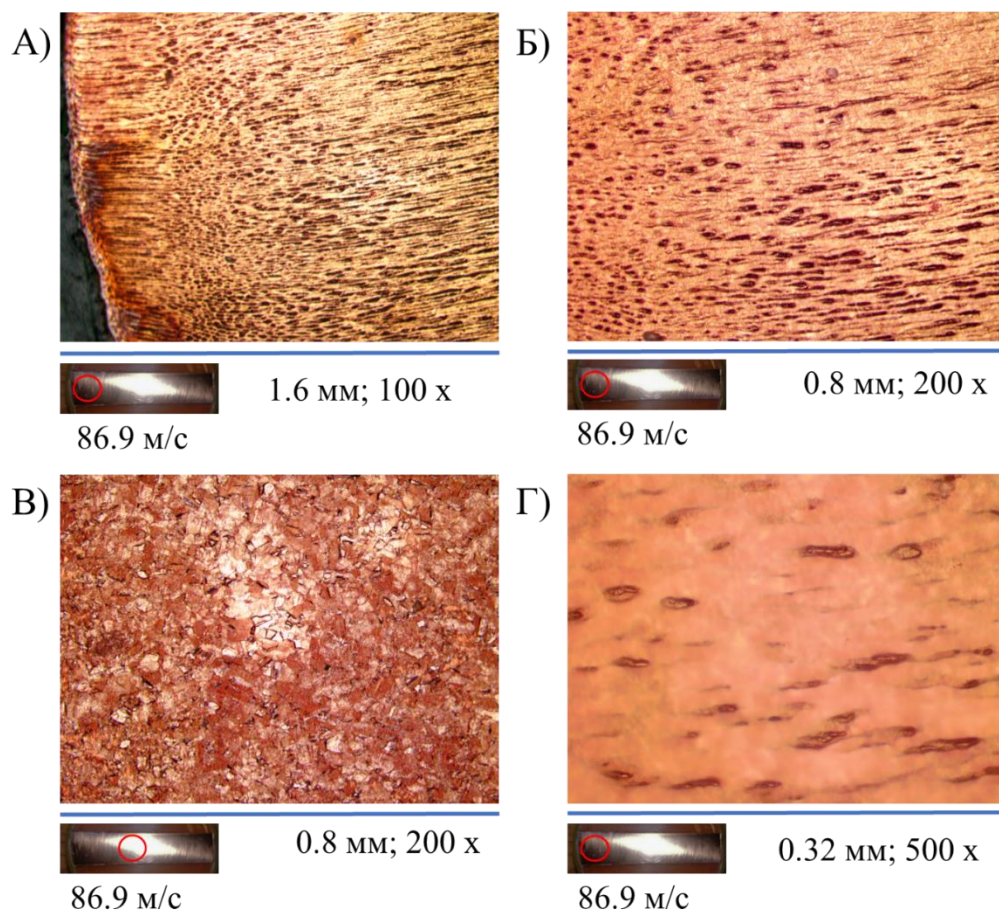


Рис. 3.15. Фотографии микроструктуры деформированного образца при ударе со скоростью 86,9 м/с: (а) – вблизи ударной поверхности, увеличение 100х; (б) – вблизи ударной поверхности, увеличение 200х; в – сочетание ультрамелкозернистой и мелкозернистой микроструктуры в зоне умеренной пластической деформации вблизи центра образца, увеличение 200х; (г) поры вблизи ударной поверхности, увеличение 500х.

3.3.2. Металлография отожженных медных образцов

Сначала рассмотрим недеформированный образец, методика шлифования, полирования и травления образца не изменилась. Никаких

примесей в образце не наблюдается. Зеренную структуру металла после травления можно наблюдать невооруженным глазом. Средний диаметр зерна недеформированного образца составляет 290 ± 60 мкм. В отожженных образцах полностью пропали полосы локализации пластического течения, а диаметр субзеренной структуры увеличился до 9 мкм. Субзеренная структура преимущественно визуализируется в виде сетки внутри больших зерен. На границах образца зеренная структура не отличается от структуры в середине образца, в отличие от холоднокатанной меди. На рис. 3.16 показаны фотографии сечения недеформированного ударника из отожженной меди.

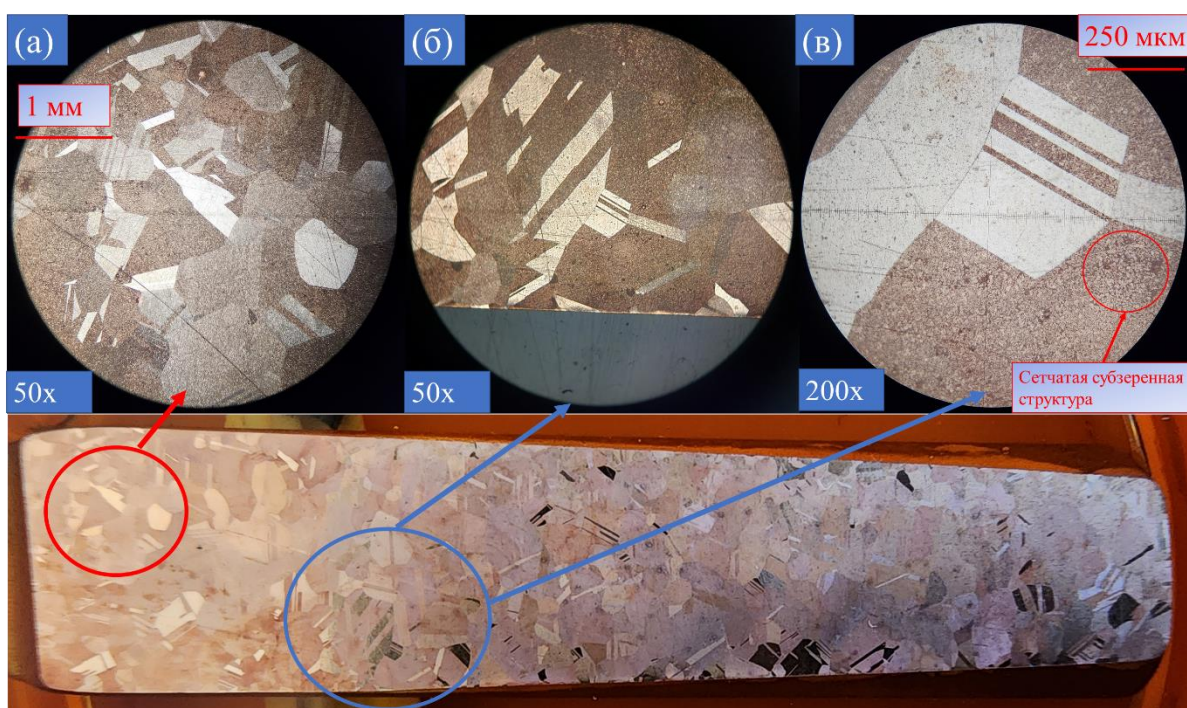


Рис. 3.16. Оптические микрофотографии поперечного сечения образца из отожженной меди, полученные с помощью металлографического микроскопа; (а), (б) – зеренная структура; (в) – структура субзерен, размер субзерен 9 мкм.

В динамически деформированном образце (8 мм цилиндр, скорость соударения 76,4 м/с) на ударной поверхности наблюдается уменьшение диаметра зерна до 85 ± 1 мкм. Вблизи ударной поверхности наблюдается характерное «перерезание» зерна вследствие пластической деформации.

Полосы локализации пластического течения, порообразные структуры и трещины не визуализируются. При этом изменение размера зеренной структуры наблюдается на протяжении всего образца, в тыльной части размер зерна составляет 150 ± 40 мкм, что меньше, чем в недеформированном образце. Можно заключить, что пластическая деформация воздействовала на материал по всей своей длине образца, изменяя в разной степени размер зерна. Такой характер измельчения зерна не был свойственен образцам из холоднокатанной меди. Фотографии деформированного образца на разных увеличениях показаны на рис. 3.17.

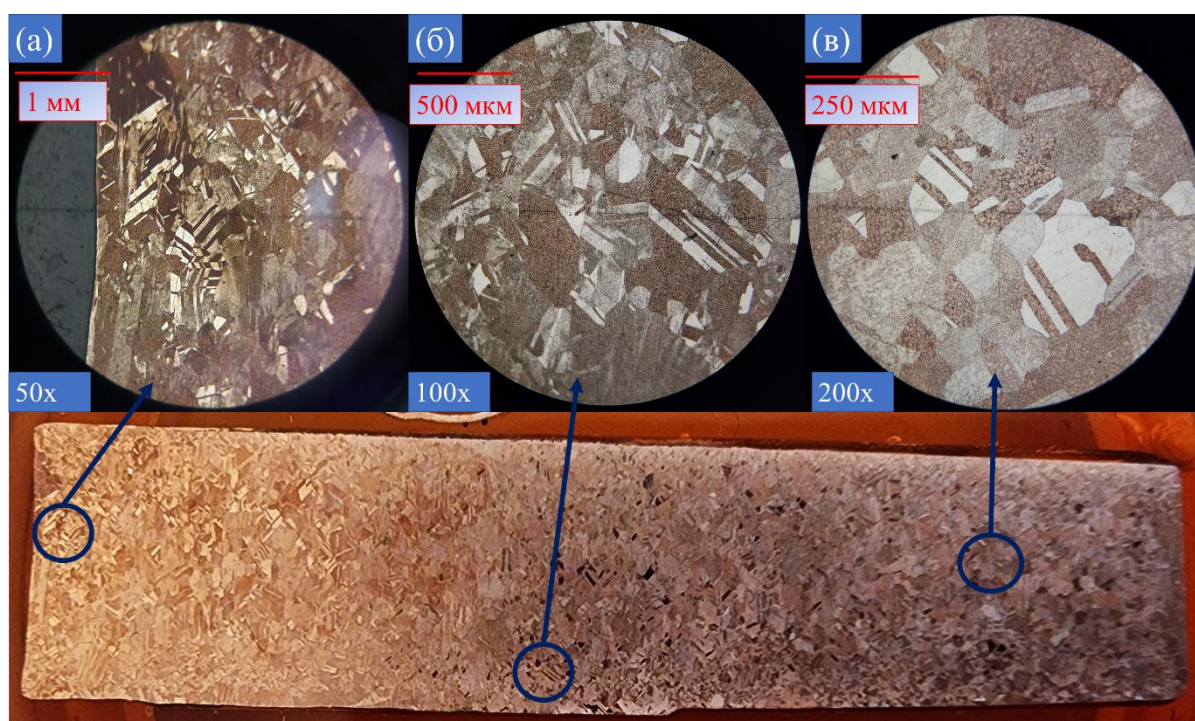


Рис. 3.17. Оптические микрофотографии поперечного сечения деформированного образца из отожженной меди (8 мм цилиндр, скорость соударения 76,4 м/с), полученные с помощью металлографического микроскопа; (а) – ударная поверхность, (б) – центральная часть образца; (в) – тыльная часть образца.

3.3.3. Металлография латунных образцов

В недеформированных областях ударников хорошо визуализируются зерна и их границы. Зерна имеют характерный блеск металлической латуни. Также большая часть зерен вытянута в направлении прокатки (в осевом направлении). Методом площадей рассчитан средний размер зерна, который составляет около 12 микрометров. При увеличении 1000х в большинстве зерен визуализируется сетчатая структура зерна, что говорит о деформациях образца, применяемой на стадии изготовления прутка. На рис. 3.18. (а-в) показаны тыльные поверхности деформированных ударников для случая 4-мм уменьшенного цилиндра и усеченного конуса, соответственно.

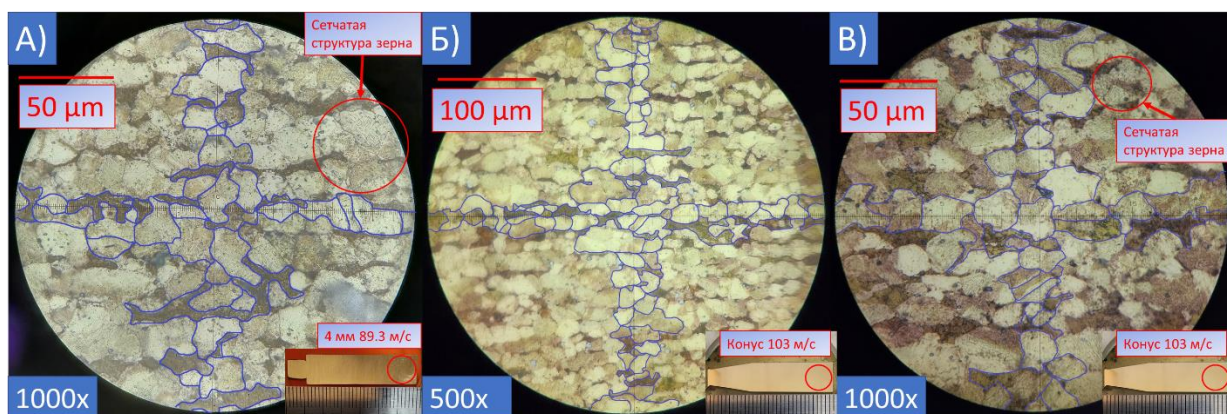


Рис. 3.19. Микрофотографии тыльных недеформированных поверхностей ударников: (а) – для случая уменьшенного 4 мм цилиндра, скорость удара 89.3 м/с при увеличении 1000х; (б) – для случая усеченного конуса, скорость удара 103 м/с при увеличении 500х; (в) – для случая усеченного конуса, скорость удара 103 м/с при увеличении 1000х.

На рис. 3.19. показаны фотографии деформированной части ударной поверхности конуса, столкнувшегося с наковальней на скорости 103 м/с. В верхней части ударной поверхности усеченного конуса (рис. 3.19. (а)) наблюдается место откола латунного фрагмента вследствие разрушения материала при деформации. В нижней части ударной поверхности (рисунок 3.19. (б-г)) визуализируется область с массивной трещиной, проходящей от плоскости ударной поверхности до боковой части образца.

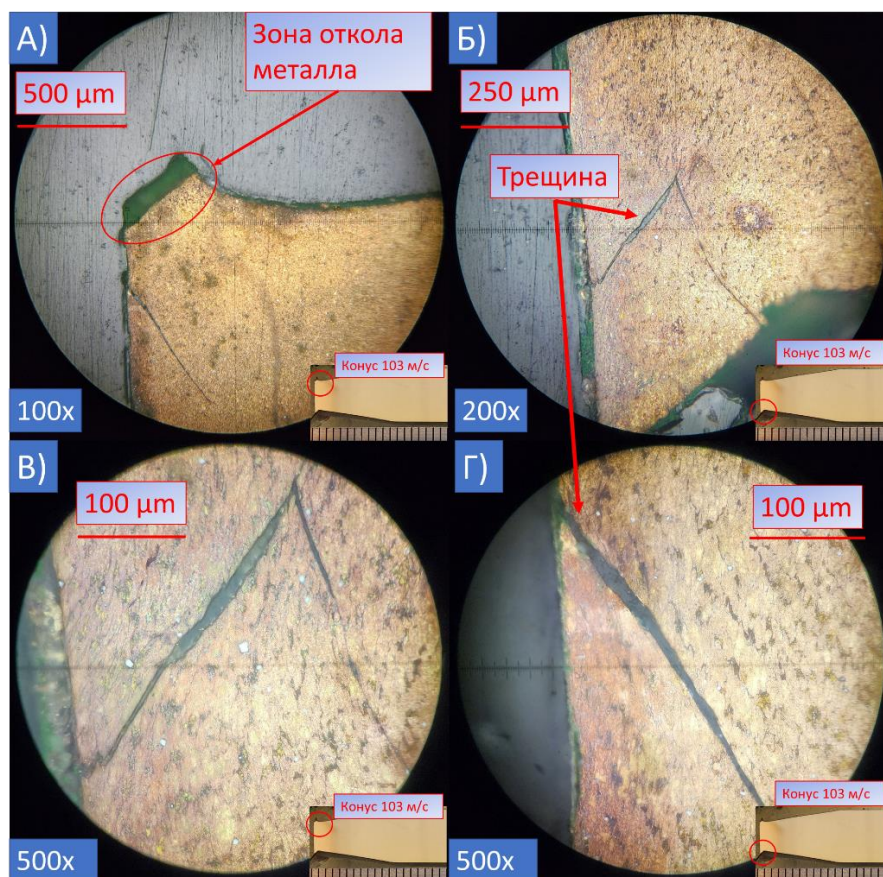


Рис. 3.19. Микрофотография деформированной поверхности усеченного конуса, скорость соударения 103 м/с: (а) – верхняя часть ударной поверхности, место откола, увеличение 100х; (б) – нижняя часть ударной поверхности, место массивной трещины, увеличение 200х; (в-г) – нижняя часть ударной поверхности, место массивной трещины, увеличение 500х.

Микроструктурный анализ показал, что вблизи ударной поверхности и непосредственно на ней, в местах наибольших деформаций, наблюдается существенное уменьшение размеров зерен вплоть до трудно визуализируемых. Это говорит о том, что в этих областях были сосредоточены наибольшие напряжения и пластические деформации, что также приводит и к образованию трещин вплоть до отколов материала. На рис. 3.20. показаны фотографии деформированного уменьшенного 4 мм цилиндра при скорости соударения 89.3 м/с. В месте перехода 4 мм уменьшенного цилиндра к основному 8 мм цилиндру визуализируется трещина (рис. 3.20. (а)), также хорошо заметна область деформации головной

части образца по измельченным зернам, на фотографии они выглядят более темными по отношению к недеформированной основной 8 мм части цилиндра. На рис. 3.20. (б) эта трещина показана при большем увеличении, равном 500х, при этом видно, что трещина, распространяясь вглубь образца, «разветвляется» на более мелкие. При большом увеличении тыльной недеформированной поверхности образца можно хорошо разглядеть сетчатую структуру зерна (рис. 3.20.(в)).

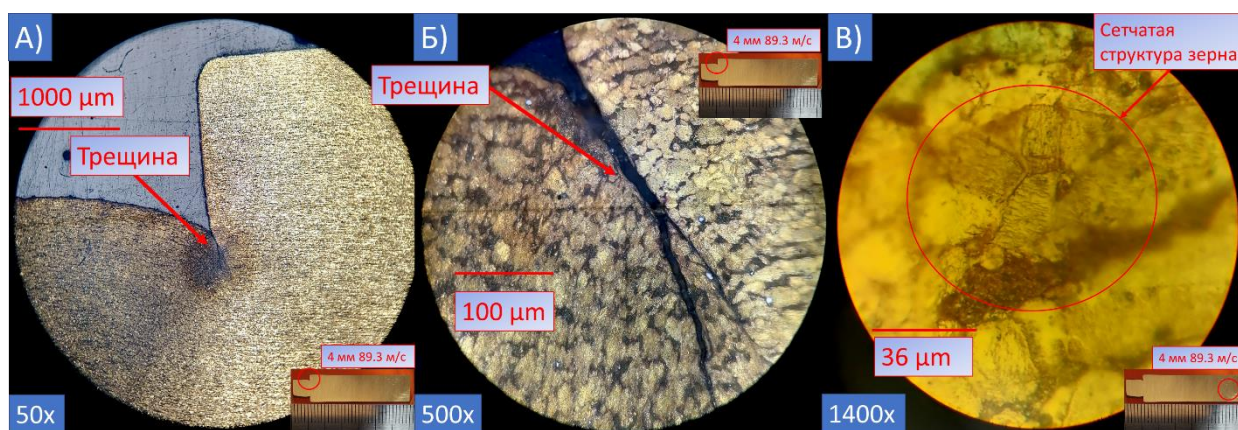


Рис. 3.20. Микрофотография деформированной поверхности уменьшенного 4 мм цилиндра при скорости соударения 89.3 м/с: (а) – область перехода головной 4 мм части цилиндра в основную 8 мм часть цилиндра, увеличение 50х; (б) – трещина в области перехода головной части в основную часть цилиндра, увеличение 500х; (в) – тыльная часть образца при увеличении 1000х, хорошо визуализируется сетчатая поверхность зерна, возникшая вследствие квазистатических деформаций при изготовлении стержня.

3.4 Аналитическая оценка динамического предела текучести для профилированных образцов

В этом разделе предлагается простой аналитический метод оценки таких важных параметров процесса динамической деформации, как динамическая прочность (предел текучести материала), скорость деформации и время остановки образца для профилированных образцов с головной

частью в виде уменьшенного цилиндра. Оценка использует размеры экспериментальных образцов до и после соударения, а также их массу и скорость соударения.

Используем приближение однородной деформации и однородных напряжений в головной части уменьшенного цилиндра. Если отсутствует деформация расширенной части, то кинетическая энергия ударника полностью расходуется на пластическую деформацию головной части ударника. Предположим, что постоянное осевое напряжение равно динамическому пределу текучести или напряжению течения Y и действует во всей головной части при торможении ударника, а радиальное напряжение равно нулю за счет боковой разгрузки. Дифференциально малое уменьшение длины dL_h головной части с текущей длиной L_h приводит к увеличению осевой деформации на dL_h / L_h , а работа осевого напряжения на этой деформации равна $Y(dL_h / L_h)V_h$, где V_h – объем головной части, который остается постоянным при пластической деформации. Полная работа при торможении должна быть равна начальной кинетической энергии ударника, что позволяет оценить динамический предел текучести как:

$$Y = mv_0^2 \left[2V_h \ln \left(\frac{L_{h0}}{L_{hf}} \right) \right]^{-1}, \quad (3.1)$$

где L_{h0} и L_{hf} начальная и конечная длина головной части ударника, m – масса ударника, v_0 – скорость удара (начальная).

Полная истинная деформация в процессе соударения вычисляется как:

$$\varepsilon_f = \ln(L_{hf} / L_{h0}). \quad (3.2)$$

Скорость деформации может быть оценена как $\dot{\varepsilon} \approx \varepsilon_f / t_f$, где t_f это время остановки ударника. Детальнее рассмотрим процесс остановки. Используя закон сохранения энергии для промежуточных моментов

торможения, можно связать текущую длину головной части L_h с текущей скоростью ударника v :

$$L_h = L_{h0} \exp \left[-\frac{m(v_0^2 - v^2)}{2YV} \right]. \quad (3.3)$$

Площадь сечения головной части равна V / L_h с учетом несжимаемости материала при пластическом течении, а текущая суммарная сила, действующая на каждое поперечное сечение и тормозящая образец, равна $Y(V / L_h)$. Закон сохранения импульса определяет снижение скорости dV в течении времени dt в следующем виде:

$$mdv = -Y(V/L_h)dt. \quad (3.4)$$

Интегрирование уравнения (3.4) до остановки ударника с учетом уравнения (3.4) позволяет получить следующее выражение для времени остановки:

$$t_f = \sqrt{\frac{\pi}{2}} L_{h0} \sqrt{\frac{m}{YV}} \exp \left(-\frac{mv_0^2}{2YV} \right) \operatorname{erfi} \left(\sqrt{\frac{mv_0^2}{2YV}} \right), \quad (3.5)$$

где $\operatorname{erfi}(\bullet)$ обозначает мнимую функцию ошибок. Комбинация уравнений (3.1), (3.2) и (3.5) позволяет оценить среднюю скорость деформации и соответствующий ей динамический предел текучести.

Для оценки динамической прочности материала были использованы экспериментальные образцы из холоднокатаной меди (см. раздел 3.2.1). В случае 3 мм уменьшенного цилиндра были проведены эксперименты в диапазоне скоростей 27 – 122 м/с, для уменьшенного 4 мм цилиндра: 19 – 120.5 м/с. В диапазоне скоростей соударения до примерно 90 м/с пластической деформации подвергается практически только профилированная головная часть. Такие образцы лучше всего подходят для применения предложенных в оценочных формул. При больших скоростях

соударения наблюдается деформация основной 8 мм части цилиндра, которая не была профилирована, это ухудшает оценку динамической прочности материала и осевой скорости деформации.

Для проверки справедливости предложенной оценки помимо экспериментальных результатов использовались результаты численного моделирования по разработанной трехмерной модели (глава 2), параметризованной для холоднокатаной меди (глава 4). Были проведены расчеты для профилированных 3 и 4 мм уменьшенных цилиндров с учетом всех экспериментальных скоростей соударения. При этом количество частиц в системе составляло около 15 тысяч, в отличие от случая параметризации меди, в которой количество частиц было около 50 тысяч. Это было сделано для уменьшения времени расчетов, при этом на точность вычислений уменьшение размера численной модели не оказывает существенного влияния как показано в пункте 2.4, рисунок 2.4. Примеры динамически деформированных образцов в сравнении с результатами численного моделирования показаны на рис. 3.21.

Уравнение (3.1) позволяет оценить динамический предел текучести, а уравнения (3.2) и (3.5) – скорость деформации и время остановки экспериментального образца. При анализе результатов трехмерного численного моделирования мы рассчитали эти величины двумя способами: (1) используя данные численной модели (SPH), усреднены при необходимости по головной части образца и по времени; (2) оценка по формулам (3.1), (3.2) и (3.5), используя результаты SPH моделирования для размеров образца до и после деформации.

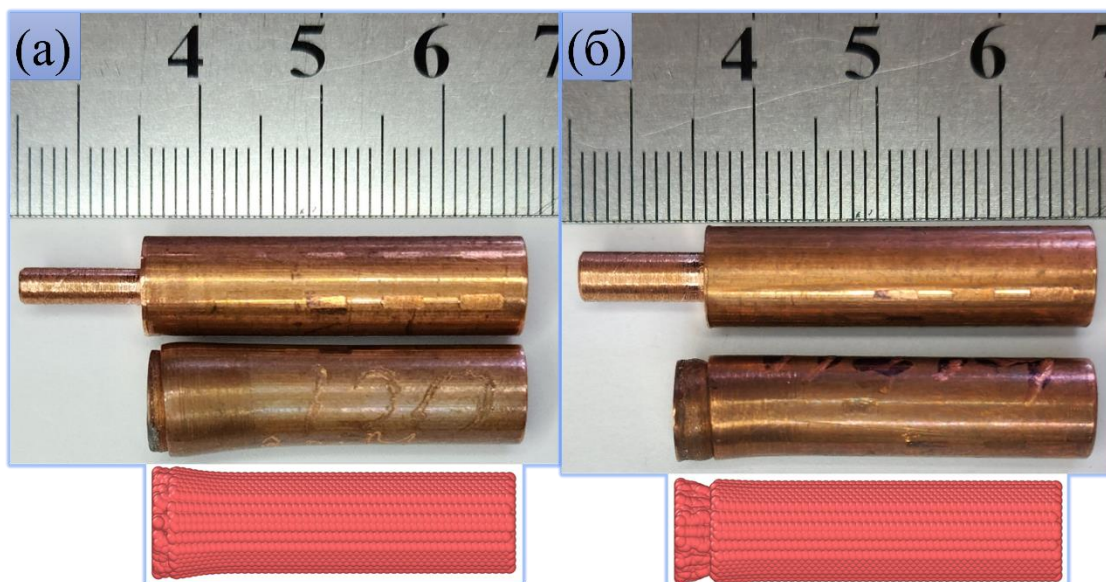


Рис. 3.21. Динамически деформированные профилированные образцы, сравнение с численным экспериментом: (а) – профилированный 3 мм уменьшенный цилиндр, скорость соударения 122 м/с; (б) – уменьшенный 4 мм цилиндр, скорость соударения 112.4 м/с.

На рис. 3.22. показаны результаты оценки скорости деформации (а,г), времени остановки (б,д) и динамического предела текучести (в,е) для случая уменьшенных 3 и 4 мм цилиндров соответственно. Для скорости деформации наблюдается хорошее соответствие расчетных данных (SPH) и приближенной оценки (Оценка SPH). На больших скоростях соударения наблюдается расхождение результатов, что объясняется деформацией основной части образца, оценка скорости деформации в таком случае становится менее точная. Осевая скорость деформации профилированной части 3 мм уменьшенного цилиндра достигает максимальных значений, равных $2.3 \cdot 10^4 \text{ с}^{-1}$ для оценки по экспериментальным образцам (Оценка эксперимента), а для уменьшенного 4 мм цилиндра $1.55 \cdot 10^4 \text{ с}^{-1}$.

Сравнение времени остановки профилированных цилиндров показало хорошее соответствие между оценкой по экспериментальным профилям, оценкой по SPH профилям, а также расчетом SPH. Тенденция к росту времени остановки ударника при небольших скоростях соударения

наблюдается для обеих форм профилированных цилиндров, в случае уменьшенного 3 мм цилиндра наибольшее время остановки наблюдается при скоростях соударения 40 – 60 м/с, достигая значения в 165 мкс, затем, при увеличении скорости соударения, время остановки ударника монотонно снижается до значений около 100 – 120 мкс. Для профилированного 4 мм цилиндра пиковые значения времени остановки около 120 мкс возникают уже в диапазоне скоростей соударения 50 -80 м/с.

В случае профилированного 4 мм цилиндра (рис. 3.22 (д) при оценивании времени остановки экспериментальных образцов можно наблюдать «колебания» оцениваемого параметра. Это можно объяснить неравномерностью деформации экспериментальных ударников, связанных с различием каждого из них в микроструктуре, количестве внутренних дефектов (экспериментальный материал является холоднокатанным тянутым прутком), а также термическом и деформационном воздействии на образцы при их профилировании на токарном станке. Выбор такого материала обуславливается тем, что токарная обработка его, в отличие от мягкой горячекатанной меди, существенно легче и проще, но при этом мы понимаем, что неоднородность его структуры может приводить к таким результатам. Лучше всего такая неоднородность проявляется при оценивании динамического предела текучести, что показано на рис. 3.22. (в,е).

Анализ кривых “SPH” и “Оценка SPH” показывает, что оценка по предложенным аналитическим формулам дает завышенное значение среднего предела текучести головной части образца по сравнению с прямым SPH расчетом. Разница особенно велика при скорости соударения более 90 м/с в обоих случаях профилированных цилиндров. Эта скорость является характерной для экспериментальных и численных образцов тем, что на таких скоростях начинается пластическая деформация основной 8 мм части цилиндра, которая не была профилирована, что не учтено в предложенных оценочных формулах. Деформация основной части цилиндров хорошо видна на представленных образцах на рисунке 3.21.

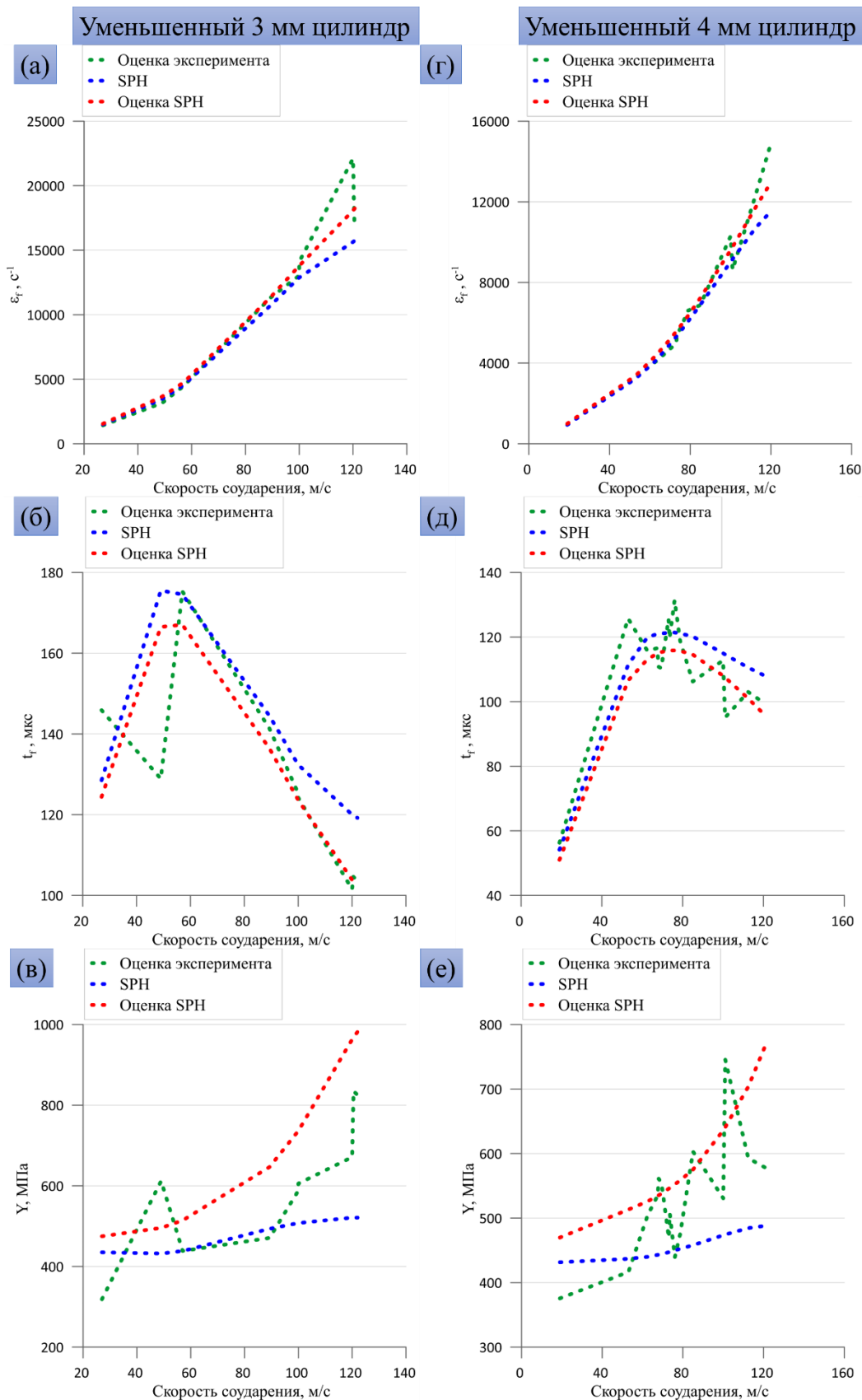


Рис. 3.22. Зависимости от скорости соударения оцениваемых параметров: скорость деформации профилированной части уменьшенного цилиндра (а,г) 3 и 4 мм, соответственно; время остановки профилированной части

уменьшенного цилиндра (б,д) 3 и 4 мм, соответственно; динамического предела текучести уменьшенного цилиндра (в,е) 3 и 4 мм, соответственно.

Выявленное расхождение побудило нас к вычислению поправочного коэффициента, равного отношению предела текучести согласно оценке (3.1) по SPH данным, к прямому SPH расчету. Учет этого коэффициента при обработке экспериментальных данных позволит нам получить более точные экспериментальные оценки динамического предела текучести и частично учесть влияние неоднородности деформации головной части образцов.

Для вычисления поправочного коэффициента рассматриваем скорости соударения до 90 м/с, при которых пластическая деформация основной части 8 мм цилиндра пренебрежимо мала. Зависимость $Y_{SPH} / Y_{SPH\ Estim}$ от скорости соударения v_0 показана на рис. 3.23. Аппроксимационная линия представляет собой следующее выражение:

$$Y_{SPH} / Y_{SPH\ Estim} = 0.0029 \cdot v_0 + 1.017. \quad (3.6)$$

Выражение (3.6) позволяет оценивать значение коэффициента $Y_{SPH} / Y_{SPH\ Estim}$ для скоростей соударения до 90 м/с. Определение \ этого коэффициента для скоростей соударения более 90 м/с не имеет особого смысла из-за начинающейся деформации не профилированной части цилиндра.

Полученная с учетом поправочного коэффициента экспериментальная оценка динамической прочности в зависимости от скорости деформации представлена на рис. 3.24. в сравнении с работами других авторов. Наши данные лежат в диапазоне скоростей деформации в пределах $10^3 - 10^4\ c^{-1}$ и превышают предел текучести, определенный в [153] для малых деформаций, на 100 - 300 МПа. При этом наши экспериментальные данные соответствуют скоростной зависимости из экспериментов [154] для большой деформации - порядка 0.5-1. Это сравнение показывает, что наши результаты не противоречат литературным данным. Следует отметить, что при скорости

деформации порядка $10^3 - 10^4 \text{ с}^{-1}$ наблюдается существенный рост скоростной чувствительности динамического предела текучести.

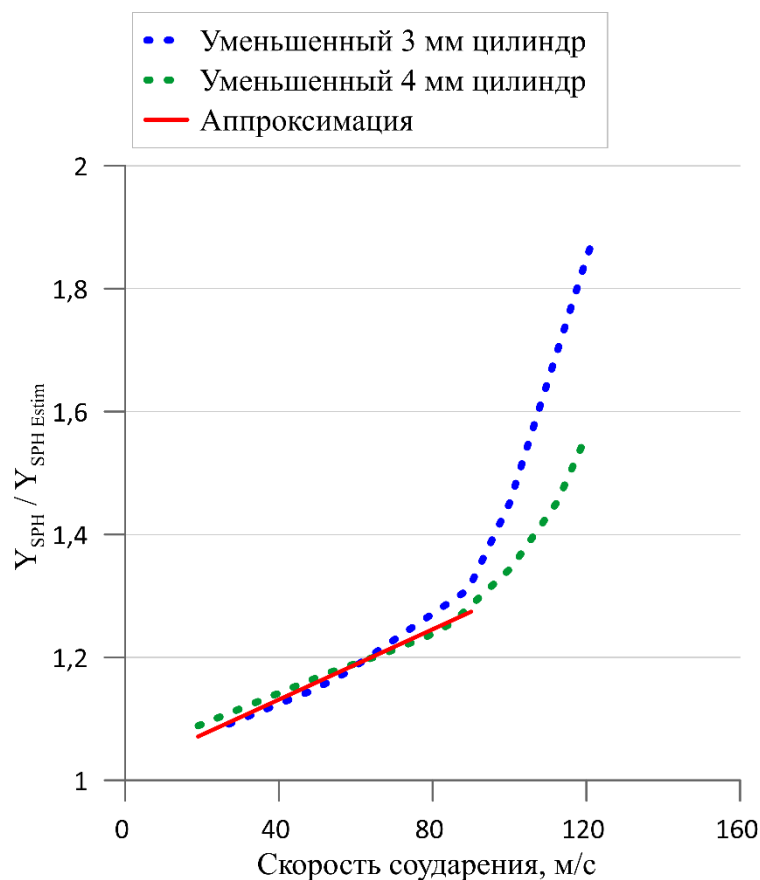


Рис. 3.23. Зависимость отношения $Y_{SPH} / Y_{SPH\ Estim}$ от скорости соударения ударника для уменьшенного 3 и 4 мм цилиндра. Аппроксимационная прямая является средним значением коэффициента для обеих форм профилированных цилиндров.

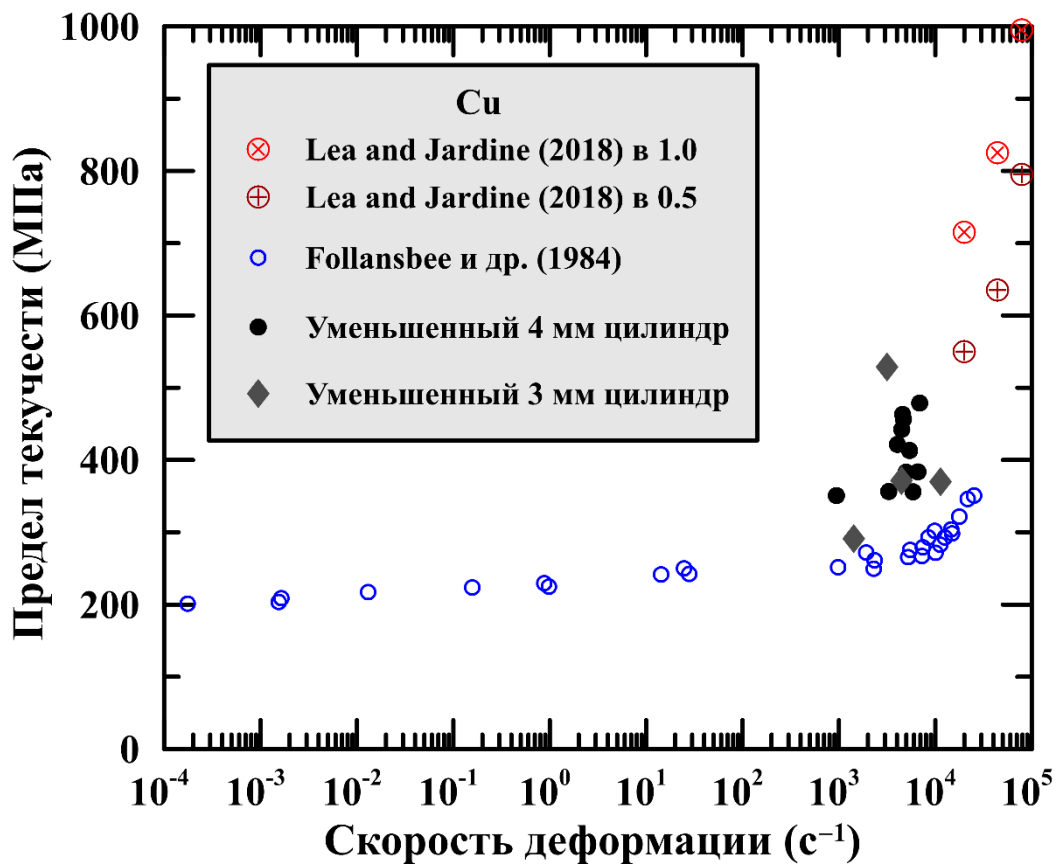


Рис. 3.24. Предел текучести в зависимости от скорости деформации, наши экспериментальные данные, оцененные с помощью уравнений (3.1, 3.2, 3.5) для профилированной части 3 и 4 мм уменьшенного цилиндра представлены в сравнении с экспериментальными данными для малой деформации (Follansbee et al., 1984) [153] и для истинной деформации 0.5 и 1 (Lea and Jardine, 2018) [154].

Выводы по третьей главе

В данной главе представлены результаты экспериментов по соударению медных, латунных и дюралюминиевых ударников с жесткой стальной преградой. Описаны результаты микроструктурного анализа деформированных и недеформированных медных и латунных ударников. Предложены формулы для приближенной аналитической оценки динамического предела текучести по тестам Тейлора с уменьшенной цилиндрической головной частью образцов.

Основные результаты третьей главы:

- 1) Впервые предложено профилирование цилиндров с целью увеличения деформаций в головной части. Представлены результаты экспериментов (тестов Тейлора) с классическими и профилированными образцами для твердой холоднокатаной меди, латуни и дюралюминия. Использование профилированных в головной части ударников позволяет добиться скоростей деформации до 10^5 с^{-1} при скорости соударения порядка 120 м/с, а также разрушения латунных и дюралюминиевых образцов при аналогичных скоростях соударения. Представлены результаты динамической деформации отожденных медных ударников. Показана разница в формах образцов между отоженными и холоднокатанными медными образцами. Все это доказывает Положение № 3 из списка результатов и положений, выносимых на защиту.
- 2) Исследована микроструктура медных образцов. В холоднокатаных образцах в исходном состоянии зерна вытянуты в направлении прокатки, средний диаметр зерна составляет 18 ± 4 мкм, визуализируется сетчатая структура субзерна размером до 3 мкм. Полосы локализации пластического течения шириной 10-20 мкм. Была оценена плотность дислокаций, создающих границы субзерен, как

лежащая в диапазоне от $1 \cdot 10^{14} \text{ м}^{-2}$ до $8 \cdot 10^{14} \text{ м}^{-2}$. Эта оценка не противоречит литературным данным. В динамически деформированных образцах размер зерна менее 1 мкм, также визуализируются порообразные структуры и трещины в основании профилированного цилиндра. В отожженных медных образцах средний диаметр зерна недеформированного образца около 290 ± 60 мкм. В отожженных образцах полосы локализации пластического течения не визуализируются, а диаметр субзеренной структуры около 9 мкм. В динамически деформированном образце (8 мм цилиндр, скорость соударения 76,4 м/с) на ударной поверхности диаметр зерна около 85 ± 1 мкм. В случае латунных образцов средний размер зерна примерно 12 микрометров. В разрушенных латунных ударниках вблизи областей разрушения зеренная структура металла сильно измельчается, визуализируются небольшие трещины.

- 3) Впервые предложена аналитическая оценка динамического предела текучести и скорости деформации по изменению длины уменьшенной головной части образцов, применимая при скоростях соударения, при которых не наступает деформация основной части образца (до 90 м/с для меди). Полученные результаты не противоречат литературным данным [153,154] и доказывают адекватность предложенной методики оценивания динамического предела текучести. Таким образом, доказано Положение № 5 из списка результатов и положений, выносимых на защиту.

Глава 4. Параметризация теоретической модели методами машинного обучения

4.1. Параметризация для случая медных образцов

Для использования разработанной в главе 2 теоретической модели необходимо определить параметры модели для конкретного рассматриваемого материала и состояния его предварительной обработки. В случае холоднокатаной меди мы выбираем часть $\{\rho_l^\delta(t=0), A_l, V_l\}$ параметров модели, которые будут подобраны по экспериментам главы 3, а остальные параметры взяты из предыдущей литературы, см. Таблицу 2.1. Данный набор оптимизируемых параметров выбран по следующим причинам. Начальная плотность иммобилизованных дислокаций $\rho_l^\delta(t=0)$ напрямую связана с предварительной обработкой образцов и может существенно отличаться для рассматриваемых холоднокатаных стержней. Коэффициент упрочнения A_l и скорость иммобилизации V_l определяют сопротивление сдвигу деформируемого материала и, следовательно, в наибольшей степени влияют на конечную форму ударно-сжатых образцов. Остальные параметры модели, характеризующие кратковременную пластическую реакцию материала, могут быть более эффективно определены либо из анализа упругого предвестника и пластического фронта плоской ударной волны при малых деформациях [59,60], либо по результатам МД моделирования. Скорость иммобилизации дислокаций (V_l) и прочность дислокационных структур (A_l) являются долговременными эффектами и не могут быть выявлены в МД моделировании. Аналогичная ситуация и для начального состояния материала ($\rho_l^\delta(t=0)$). При дальнейшем развитии параметризации модели сочетание краткосрочных данных МД с

относительно длительными экспериментами является перспективным подходом к оптимизации всего набора параметров в целом.

4.1.1. Обучение ИНС-эмулятора трехмерной модели

Учитывая разные формы образцов и разную скорость удара, ручной подбор параметров модели требует слишком много времени, а выбор наилучшего результата этим методом не гарантируется. Для автоматизации поиска оптимальных параметров используются искусственная нейронная сеть (ИНС) и байесовский алгоритм. Статистический байесовский алгоритм включает проверку большого количества пробных наборов параметров и требует большого количества вычислений, если он реализован непосредственно с помощью трехмерной теоретической модели на основе SPH. Поэтому ИНС используется как быстрый эмулятор модели SPH; структура используемой ИНС представлена на рис. 4.1.

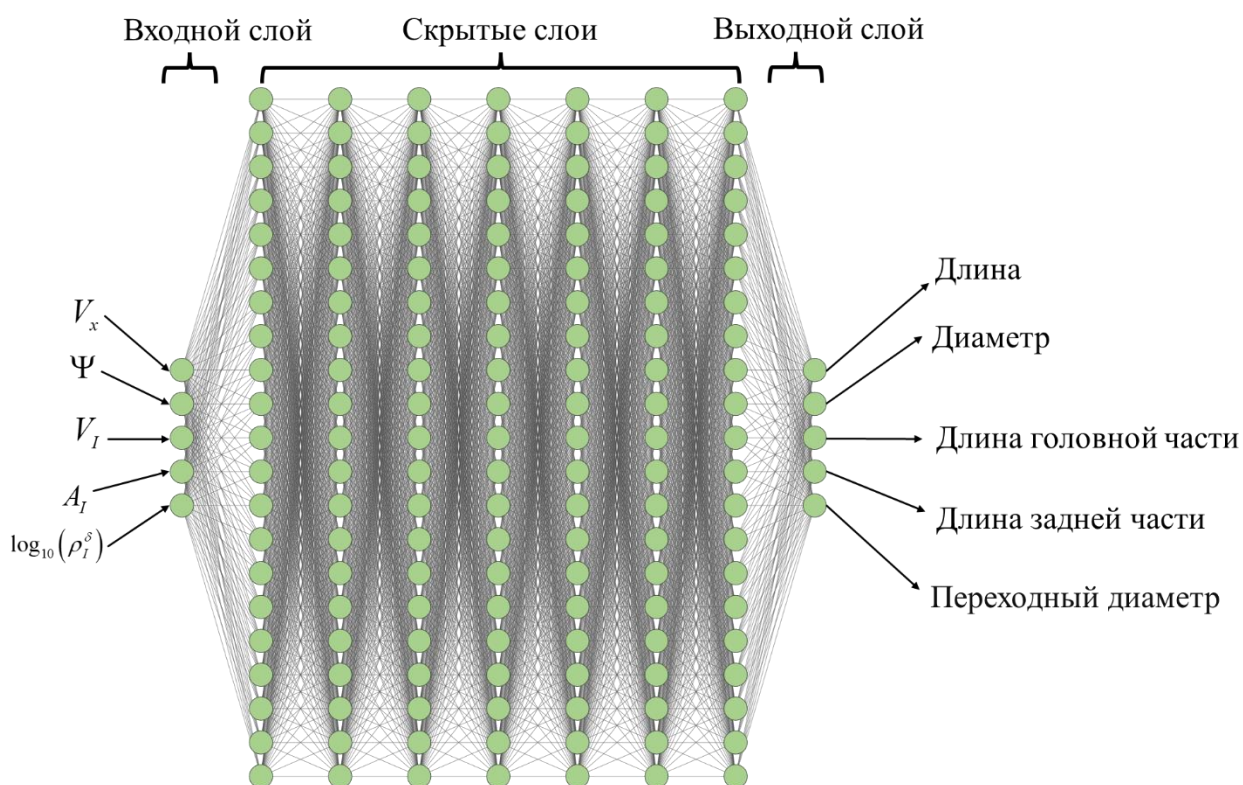


Рис. 4.1. Структура ИНС для эмуляции трехмерной теоретической модели меди: 7x21 скрытых слоев, 5 входов и 5 выходов; нейроны располагаются

слоями, и сигналы передаются в одном направлении – от входного слоя к выходному слою.

Используя трехмерную теоретическую модель на основе SPH, была подготовлена база данных для обучения ИНС (более 2000 результатов) и тестовая база данных для валидации точности обучения ИНС (350 результатов). База данных представляет собой набор соответствующих входных и выходных значений. На вход ИНС поступают пять значений: $\{V_x, \Psi, \rho_l^\delta(t=0), A_l, V_l\}$, где V_x – скорость удара, Ψ – код формы образца (0 для однородного 8-мм цилиндра, 1 для уменьшенного 4-мм цилиндра, 2 для уменьшенного 3-мм цилиндр и 3 для усеченного конуса), $\rho_l^\delta(t=0)$ – начальная плотность иммобилизованных дислокаций в каждой системе скольжения, A_l – коэффициент упрочнения, V_l – скорость иммобилизации. Выход ИНС характеризует степень деформации и форму деформированного образца после удара. Он содержит следующие пять значений: финальная длина образца, финальный диаметр ударного конца, финальная длина головной части, финальная длина основной (задней) части цилиндра и переходный диаметр после удара. Выходные значения выбирались таким образом, чтобы учитывать форму образцов при сильных деформациях. Например, в случае профилированного цилиндра при большой скорости удара деформируется в том числе и основная 8-мм часть цилиндра, что необходимо учитывать для хорошего согласия численного расчета с экспериментом; эта деформация характеризуется переходным диаметром. Схема измерения выходных параметров приведена на рис. 4.2.(е).

Входные параметры разыгрывались случайным образом с равномерным распределением в пределах диапазонов, показанных в таблице 4.1. С этими входными параметрами были проведены трехмерные расчеты SPH. Процесс вычисления значений для базы данных был распараллелен с использованием подхода OpenMP. Этот подход

используется для проведения большого количества однотипных вычислений; каждый поток выполняет свой расчет численного эксперимента со своим набором параметров. Каждый численный расчет проводился до остановки задней части образца, после чего поток получал следующую задачу с новым набором параметров. Расчеты проводились на компьютере с 64-ядерным (128-поточном) процессором, что заняло несколько недель.

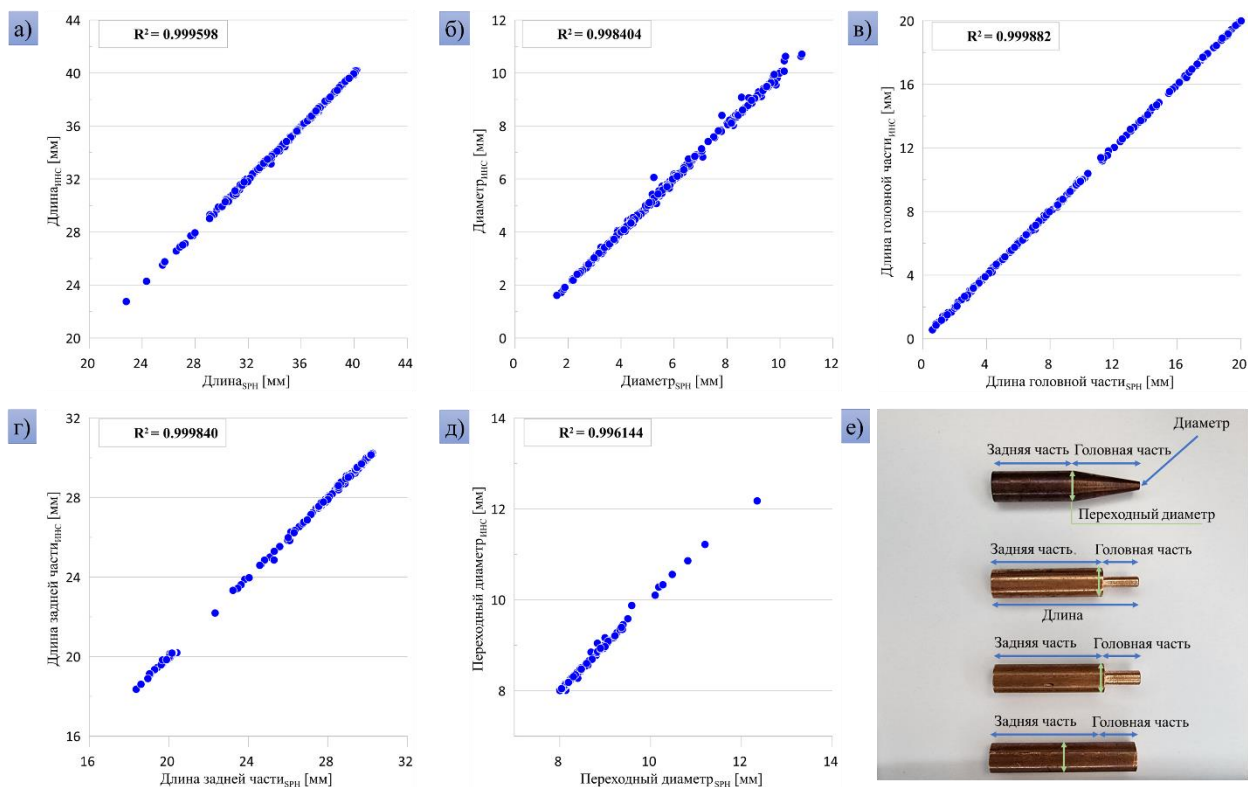


Рис. 4.2. Корреляционные кривые, проверка точности нейронной сети на тестовых данных, (а) – соотношение длин; (б) – отношение диаметров; (в) – отношение длины головной части, (г) – отношение длины задней части; (д) – отношение переходного диаметра; (е) – схема измерения выходных параметров.

Таблица 4.1. Диапазоны входных значений ИНС.

Параметр модели	Область разыгрываемых значений
V_x [m/s]	0...150
Ψ	0...3

$\log_{10}(\rho_l^\delta)$ [m ⁻²]	10...15
A_l	0...10
V_l [m/s]	0...5

В качестве эмулятора используется полносвязная искусственная нейронная сеть с прямой связью. Она состоит из 5 нейронов входного слоя, 5 нейронов выходного слоя и 7 скрытых слоев по 21 нейрону в каждом слое (см. рис. 4.1.). Количество нейронов выбирается как $4N^{\text{inputs}} + 1 = 21$, где N^{inputs} - количество входных параметров. Функция Sigmoid Linear Unit (SiLU) используется в качестве передаточной функции для всех нейронов, а в качестве функции потерь, то есть меры текущей ошибки, которую нужно минимизировать, используется кросс-энтропия.

Обучение ИНС сводится к нахождению весов и смещений нейронов, обеспечивающих минимальную ошибку при отображении входных данных в выходные данные. ИНС была обучена методом обратного распространения с использованием пакетного градиентного спуска и алгоритма оптимизации ADAM. Обучение ИНС проводилось с использованием собственного кода FORTRAN, это было сделано для обеспечения полной совместимости с кодом SPH. Процесс обучения ИНС был распараллелен с использованием подхода OpenMP. Каждый вычислительный поток обучает свой пример ИНС с уникальным набором случайно выбранных начальных параметров нейронов, размером пакета и скоростью обучения, что в совокупности приводит к индивидуальной траектории обучения каждого экземпляра ИНС; в конце выбирается лучший. Количество скрытых слоев и количество нейронов в каждом скрытом слое являются константами для всех вычислительных потоков и экземпляров ИНС.

ИНС включает 3008 подбираемых параметров, которые представляют собой веса и смещения искусственных нейронов. Учебная база данных содержит более 2000 обучающих примеров симуляций SPH с 5 выходными параметрами для каждой симуляции, что означает, что в общей сложности

нужно обеспечить соответствие для более чем 10 000 чисел. После процесса обучения выбирается набор весов и смещений нейронов ИНС, показавший наибольшую точность. Удалось обучить ИНС до уровня среднеквадратичной ошибки 0,4% и максимальной ошибки 4,62% на проверочных данных; корреляционные кривые показаны на рис. 4.2. (а-е). Полученное качество ИНС на проверочном наборе данных свидетельствует об отсутствии переобучения. Помимо контроля среднеквадратичной ошибки важен контроль максимальной ошибки, потому что ИНС с высокой максимальной ошибкой при низкой среднеквадратической ошибке может давать непредсказуемый результат, хотя и для небольшого числа точек.

4.1.2. Оптимизация параметров модели статистическим методом Байеса для твердой меди

После обучения ИНС используется как быстрый эмулятор трехмерной теоретической модели ударника для определения оптимальных параметров модели с помощью байесовского алгоритма калибровки. Из эксперимента у нас есть список из 50 строк, содержащих скорость удара V_x , форму образца Ψ и пять значений для сравнения (финальная длина образца, финальный диаметр в плоскости соударения, финальная длина головной части, финальная длина задней части цилиндра и переходный диаметр, см. рис. 4.2(е)). Три выбранных параметра модели $\{\rho_l^\delta(t=0), A_l, V_l\}$ разыгрываются случайным образом в пределах диапазонов, совпадающих с теми, которые использовались для обучения ИНС (см. таблицу 4.1.). Для каждого конкретного набора параметров модели $\{\rho_l^\delta(t=0), A_l, V_l\}$ два других входа ИНС $\{V_x, \Psi\}$ проходят через все 50 экспериментов списка. Для каждого эксперимента все пять входных данных подаются в ИНС, которая вычисляет выходные значения, и вероятность (правдоподобность) набора параметров оценивается с помощью уравнения:

$$P = \exp \left\{ -\sigma \sum_{n=1}^{N^{EXP}} \sum_{j=1}^5 \left(Y_{j,n}^{EXP} - Y_{j,n}^{ANN} \right)^2 \right\}, \quad (4.1)$$

где σ – постоянная нормировки, $Y_{j,n}^{ANN}$ – j -й выход ИНС для n -го эксперимента, $Y_{j,n}^{EXP}$ – соответствующие экспериментальные характеристики деформированного образца, $N^{EXP} = 50$ – количество различных экспериментов (различные формы образца и скорости удара). Чем выше вероятность, тем лучше выбранные параметры описывают экспериментальные результаты. Поиск оптимальных параметров с помощью быстрого эмулятора на основе ИНС и байесовского подхода был распараллелен с использованием подхода OpenMP.

Как экспериментальные, так и численные данные имеют определенные погрешности, прежде всего, из-за отсутствия точной осевой симметрии. Кроме того, результаты SPH получаются с конечной дискретностью, что характерно для любого численного метода. В уравнении (4.1) сравниваются средние значения экспериментальных и числовых данных; никакой специальной обработки диапазонов ошибок в этой оценке вероятности набора параметров нет. С другой стороны, байесовский подход представляет собой статистический метод, основанный на большом количестве сравнений модель-эксперимент, и неопределенности как численных, так и экспериментальных данных компенсируются этими множественными сравнениями. В нашем случае численная модель сравнивается с $5N^{EXP} = 250$ экспериментальными данными, как показано в уравнении (4.1).

На рис. 4.3(г-е) карты распределения вероятностей параметров модели построены с использованием 100 тысяч розыгрышей и всего набора экспериментов для сравнения. Рассматривались также другие числа розыгрышей для изучения сходимости результатов. В максимуме было задействовано 10 миллиардов розыгрышей; построение таких карт с помощью быстрого эмулятора на основе ИНС заняло 7 часов на 8-ядерном (16-поточном) процессоре AMD Ryzen 2700, а 100 расчетов модели SPH на

том же процессоре в параллельном режиме выполняются за 1 неделю. 10 миллиардов точек это всего около 2000 значений на каждый параметр, но даже такая сетка избыточна и реализована в основном за счет быстрой работы эмулятора на основе Практика показывает, что даже 40 – 50 значений на параметр часто бывает достаточно для локализации области оптимальных параметров. Этот момент проиллюстрирован на рис. 4.3., где используется всего 100 тысяч розыгрышей, что означает около 46 значений на параметр, но позволяет локализовать области максимальной вероятности. Карты вероятностей показывают, что области высокой вероятности образуют относительно узкие полосы на плоскостях в пространстве параметров. Эти полосы означают, что неправильное изменение одного из параметров может быть частично компенсировано двумя другими параметрами. Например, увеличение скорости иммобилизации V_1 или начальной плотности иммобилизованных дислокаций $\rho_1^\delta(t=0)$ может быть частично компенсировано уменьшением коэффициента упрочнения A_1 , см. рис. 4.3.(а,б). С другой стороны, предпочтительные значения скорости иммобилизации V_1 и начальной плотности иммобилизованных дислокаций $\rho_1^\delta(t=0)$ могут расти одновременно, см. рис. 4.3(в). Согласно модели дислокационной пластичности увеличение либо начальной плотности иммобилизованных дислокаций, либо скорости иммобилизации увеличивает текущую плотность иммобилизованных дислокаций, а одновременное уменьшение коэффициента упрочнения возвращает статический предел текучести в уравнении (2.20) к уровню, соответствующему экспериментальным данным. Этим можно объяснить обратную зависимость между высоко вероятностными значениями V_1 и $\rho_1^\delta(t=0)$ с одной стороны, и A_1 , с другой стороны.

● $V_I = 0.09, \text{ м/с}; A_I = 4.7; \rho_I^\delta = 2.5 \times 10^{12}, \text{ м}^{-2}$

● $V_I = 0.4, \text{ м/с}; A_I = 2.8; \rho_I^\delta = 6.3 \times 10^{12}, \text{ м}^{-2}$

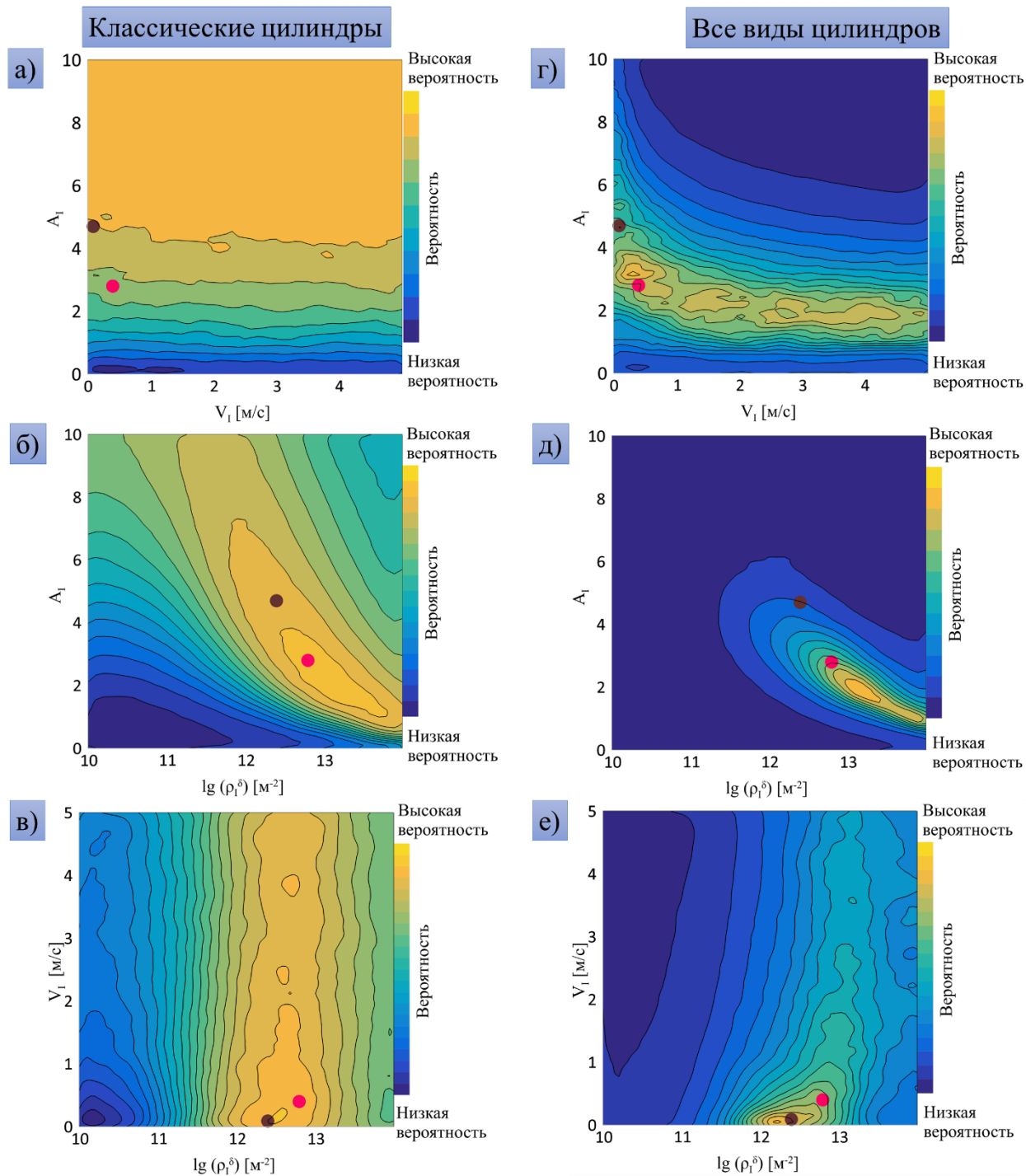


Рис. 4.3. Карты распределения вероятности (правдоподобности) параметров модели, построенные в плоскостях: (а, г) $V_I - A_I$, (б, д) $\rho_I^\delta - A_I$ и (в, е) $\rho_I^\delta - V_I$. Распределение, представленное в (а-в), построено с использованием только классических цилиндров Тейлора, а распределение, представленное в (г-е), построено с использованием всей серии экспериментов. Используется 100

тысяч случайных розыгрышей. Маленькие кружки показывают два самых высоких локальных максимума для случая карты вероятностей с 10 миллиардами розыгрышей и полным набором экспериментов.

На рис. 4.3. на представленных двухпараметрических графиках, являющихся проекциями трехпараметрического пространства, есть несколько областей с наибольшими вероятностями. Эти графики приведены для наглядности, а параметры модели с максимальной вероятностью могут быть найдены при работе программного алгоритма байесовского расчета вероятности. На основе 10 миллиардов розыгрышей рассмотрим два высших локальных максимума со следующими параметрами модели: (i) $V_I = 0,09$ м/с, $A_I = 4,7$ и $\rho_I^\delta = 2,5 \cdot 10^{12}$ м², и (ii) $V_I = 0,4$ м/с, $A_I = 2,8$ и $\rho_I^\delta = 6,3 \cdot 10^{12}$ м². Эти два набора параметров использовались далее в расчетах по трехмерной теоретической модели (SPH); сравнение полученных результатов с экспериментом показано на рис. 4.6–4.9. Оба максимума обеспечивают близкие результаты расчетов и разумное согласие с экспериментом, что свидетельствует об адекватности модели. Максимум (ii) был выбрано для дальнейших численных расчетов, поскольку он ближе к параметрам модели, ранее использовавшимся для моделирования плоских ударных волн в [60]. Следует отметить, что использование параметров модели, лежащих далеко от области максимальной вероятности, обеспечивает гораздо худшее соответствие теоретической модели эксперименту.

Карты вероятностей, построенные с использованием только классических цилиндров Тейлора, представлены на рис. 4.3(а-в) для сравнения. Видно, что классические цилиндры Тейлора обеспечивают более низкое качество параметризации модели по сравнению со всей серией экспериментов: зоны высокой вероятности значительно шире и менее определены; оптимальный коэффициент упрочнения смещен в область более высоких значений на рис. 4.3(а), в то время как скорость иммобилизации четко не определена на рис. 4.3(а,в). Этот недостаток классических

цилиндров может быть частично преодолен путем экспериментального изучения более высоких скоростей удара для увеличения скорости деформации и величины деформации, но использование профилированных цилиндров решает эту проблему проще.

Чтобы дополнительно выяснить характеристики различных подмножеств профилированных цилиндров для параметризации модели, были построены аналогичные карты вероятностей для случаев только уменьшенных 3 и 4 мм цилиндров и усеченного конуса, см. рис. 4.4. Каждое из этих подмножеств более эффективно, чем классические цилиндры, поскольку они дают более узкие зоны с высокой вероятностью параметров модели. Наилучший результат наблюдается для цилиндров с конической головной частью, рис. 4.4(ж-и), за ним следуют уменьшенные 3 мм цилиндры, рис. 4.4(а-в), а самую слабую степень локализации дают уменьшенные 4 мм цилиндры, рис. 4.4(г-е). Относительно слабые результаты 4-мм цилиндров объясняются меньшей скоростью деформации и примерно в 2 раза меньшими истинными деформациями по сравнению со случаем усеченного конуса. При этом каждое подмножество дает смещенную оценку параметров модели, а значит, они лучше оптимизированы для данной конкретной задачи, но хуже воспроизводят всю серию экспериментов. Поэтому использование нескольких форм ударников имеет смысл.

Для параметризации модели используются пять характеристик деформированных образцов: общая конечная длина, диаметр пятна удара, длина головной части, длина задней части и диаметр перехода. Этот набор характеристик выбран так, чтобы в компактной форме описать наиболее существенные особенности деформации образца. Так, длина задней части и диаметр перехода отклоняются от исходных значений только при сильных деформациях профилированных образцов при высоких скоростях удара. Карты вероятностей, учитывающие только общую конечную длину и диаметр пятна удара, представлены на рис. 4.5(а-в), а случай использования только остальных трех параметров вместо этого представлен на рис. 4.5(г-е).

Сравнение с рис. 4.3(г–е) показывает, что первая пара характеристик вносит основной вклад и может использоваться отдельно. Остальные три характеристики являются вспомогательными, и использование только этих характеристик дает смещенную оценку параметров модели.

- $V_I = 0.09, \text{ м/с}; A_I = 4.7; \rho_I^\delta = 2.5 \times 10^{12}, \text{ м}^{-2}$
- $V_I = 0.4, \text{ м/с}; A_I = 2.8; \rho_I^\delta = 6.3 \times 10^{12}, \text{ м}^{-2}$

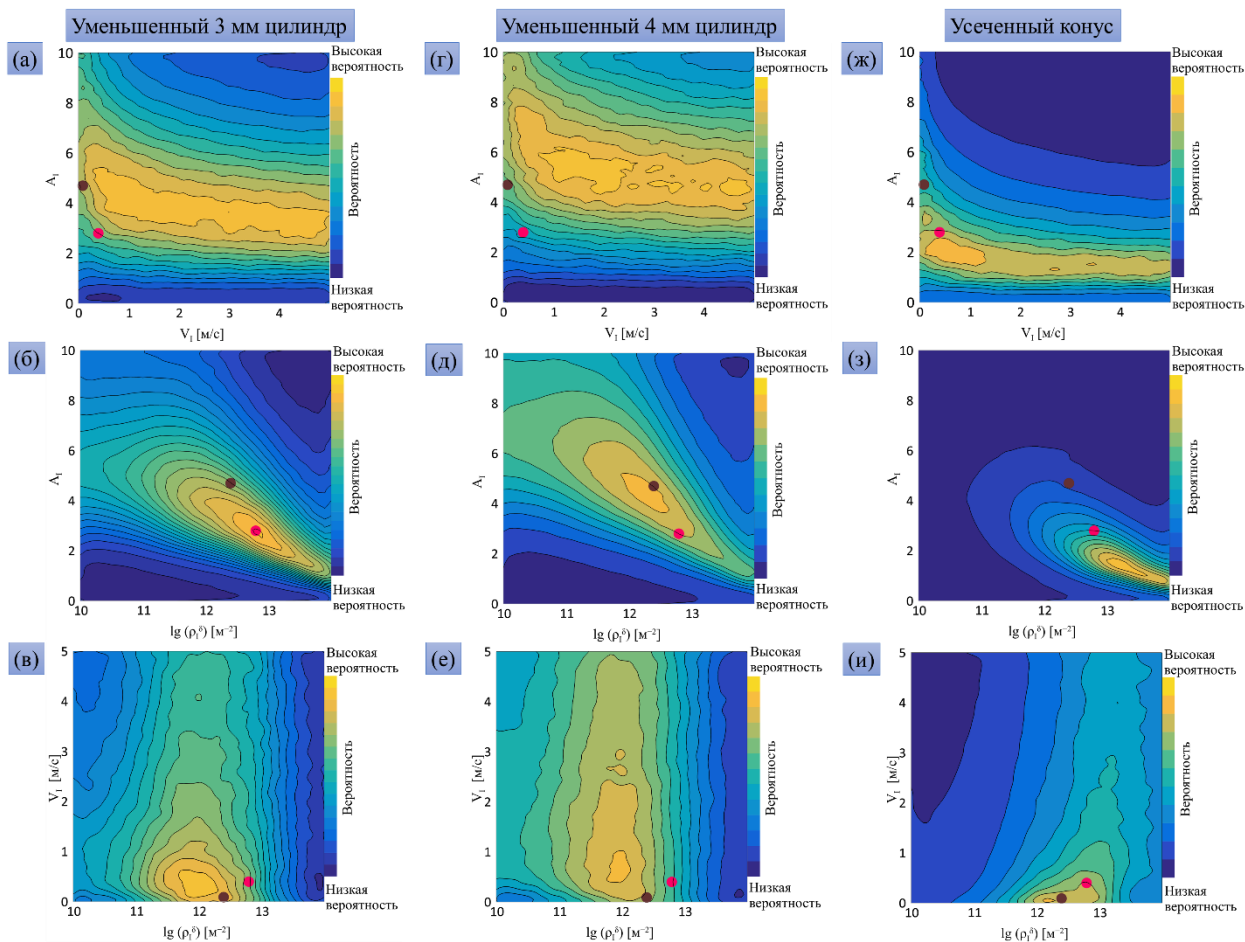


Рис. 4.4. Карты распределения вероятностей параметров модели в плоскости: (а,г,ж) $V_I - A_I$, (б,д,з) $\rho_I^\delta - A_I$ и (в,е,и) $\rho_I^\delta - V_I$. Распределения, представленные в (а-в), (г-е) и (ж-и), построены с использованием только уменьшенных 3 мм цилиндров, уменьшенных 4 мм цилиндров и усеченных конусов в головной части, соответственно. Используется 100 тыс. случайных розыгрышей. Маленькие кружки показывают два самых высоких локальных максимума для случая карты вероятности с 10 миллиардами розыгрышей и полным набором экспериментов.

- $V_I = 0.09, \text{ м/с}; A_I = 4.7; \rho_I^\delta = 2.5 \times 10^{12}, \text{ м}^{-2}$
- $V_I = 0.4, \text{ м/с}; A_I = 2.8; \rho_I^\delta = 6.3 \times 10^{12}, \text{ м}^{-2}$

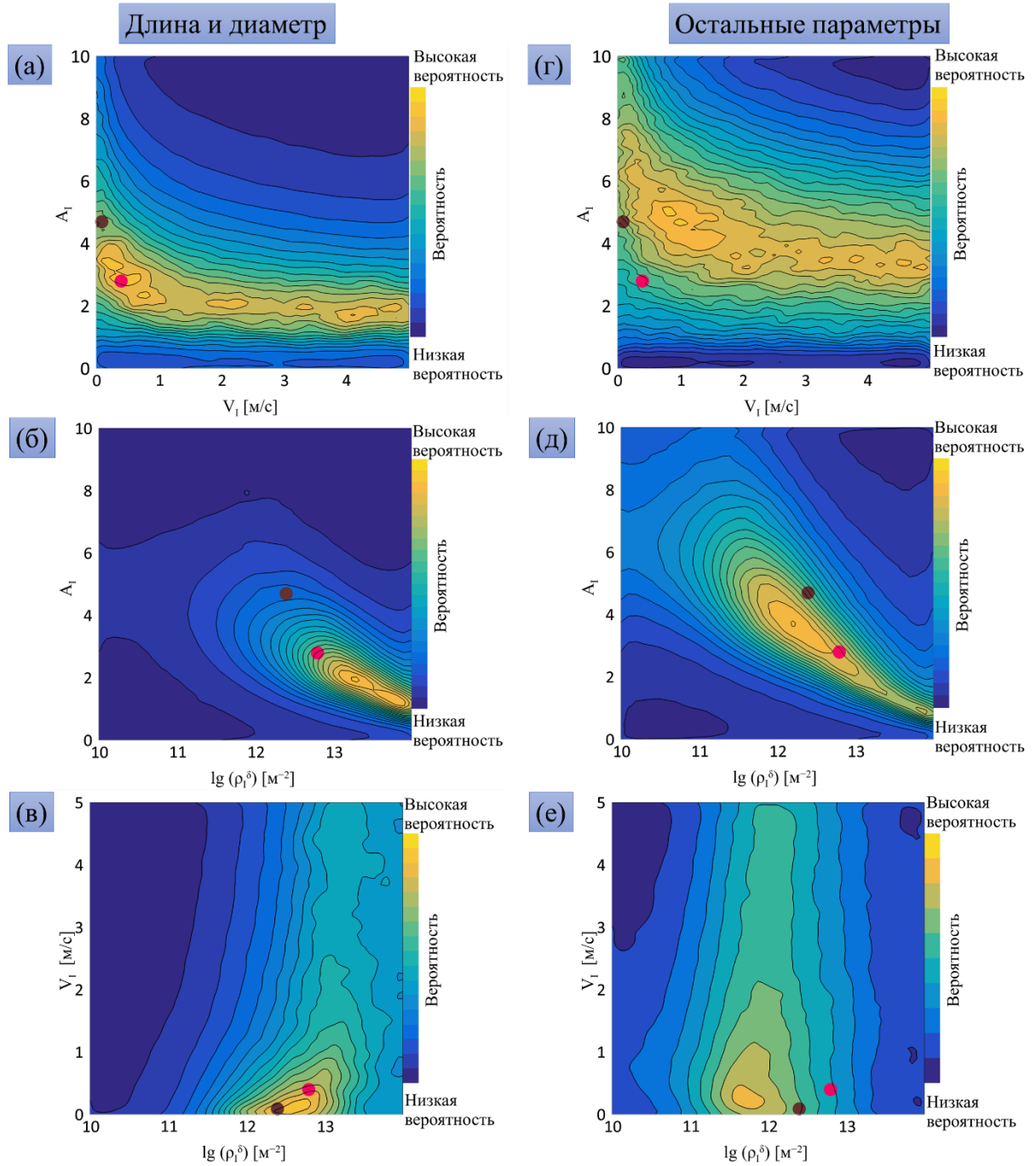


Рис. 4.5. Карты распределения вероятностей параметров модели в плоскости: (а,г) $V_I - A_I$, (б,д) $\rho_I^\delta - A_I$ и (в,е) $\rho_I^\delta - V_I$. Распределение, представленное в (а–в), построено с использованием только общей конечной длины и диаметра пятна удара, тогда как (г–е) построено с использованием только трех других параметров (длина головной части, длина задней части и диаметр перехода).

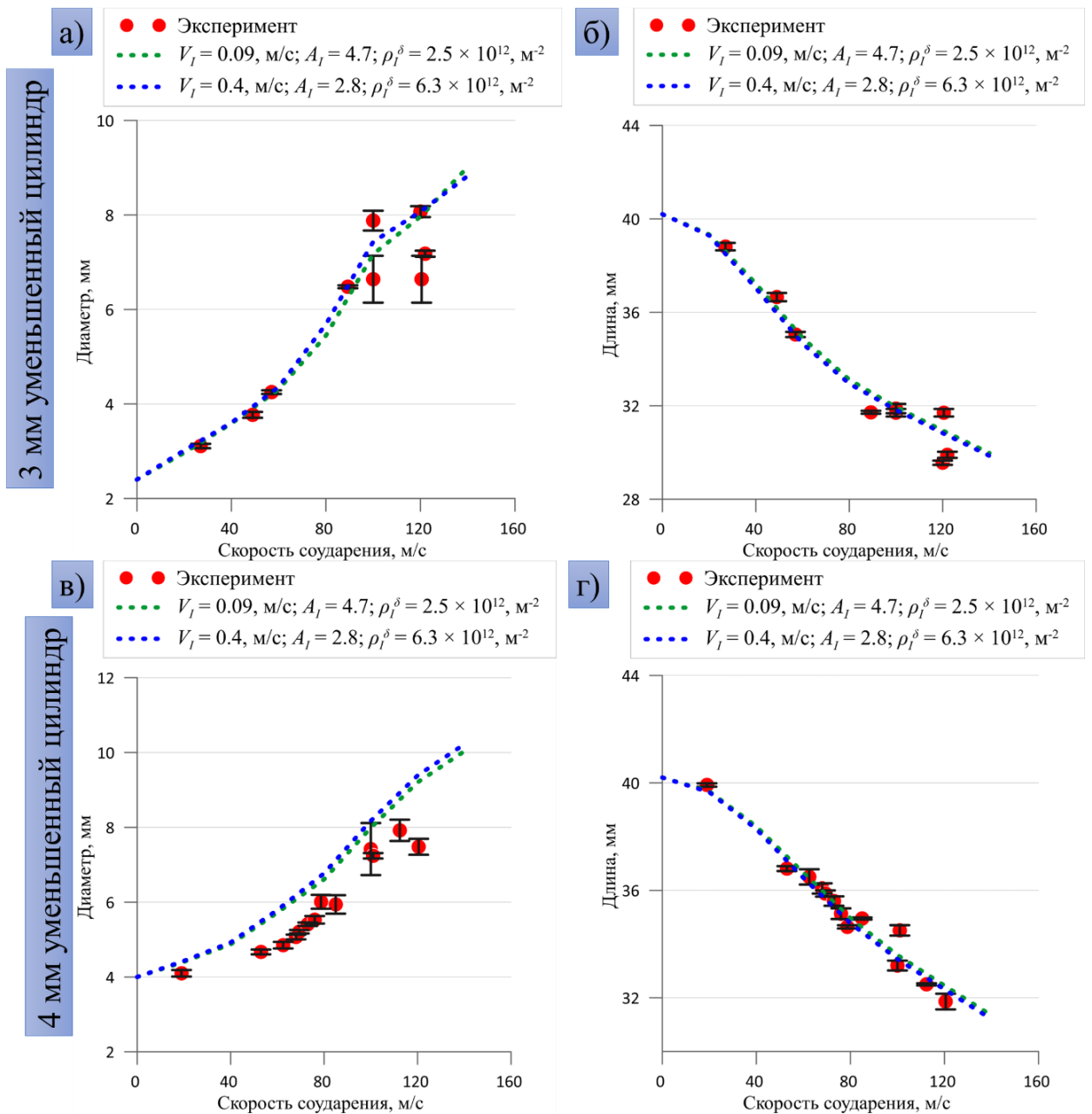


Рис. 4.6. Сравнение результатов трехмерной теоретической модели (SPH) с экспериментальными данными. Зависимости от скорости удара: (а) финального диаметра в плоскости соударения и (б) финальной длины 3-мм уменьшенного цилиндра; (в) финального диаметра в плоскости соударения и (г) финальной длины 4-мм уменьшенного цилиндра.

Рассмотрим сравнение параметризованной трехмерной теоретической модели с экспериментами, представленное на рис. 4.6–4.9 более подробно. Теоретическая модель дает статистически обоснованное описание как трендов, так и значений конечной длины и диаметра в плоскости соударения

для всех форм образцов. Совпадение не абсолютное, но в процессе оптимизации изменяются только три параметра модели для одновременного описания 50 экспериментов с образцами разной формы. Отклонение при больших скоростях удара не превышает разброса экспериментальных данных. Кроме того, экспериментальные точки для двух максимальных скоростей удара на рис. 4.7(в,г) для классических цилиндров Тейлора не использовались при калибровке параметров, но они адекватно воспроизводятся моделью. Изменение длины головной части на рис. 4.8(а,г) и 4.9(а,г) в определенной степени повторяет эволюцию общей длины (рис. 4.6(б,г) и 4.7(б,г)). Длина задней части и переходный диаметр начинают изменяться только при больших скоростях удара в случае головных частей 3 и 4 мм 4.8(б,в,д,е). В случае конической головной части эти два размера остаются неизменными в исследованном диапазоне скоростей удара рис. 4.9 (д, е) это означает, что пластическая деформация полностью локализована в головной части конуса. Отметим, что в случае конусов, рис. 4.9(д), мы имеем экспериментальные данные для двух серий образцов с исходной длиной задней части, отличающейся примерно на 2 мм. Обе серии используются потому, что эта разница в исходной форме существенно не влияет на угол конуса и деформацию при ударе. При этом оптимизированный SPH не показывает изменения конечной длины задней части конусообразных образцов с увеличением скорости удара, и такое поведение аналогично наблюдаемому в эксперименте. В случае классических цилиндров все вспомогательные размеры изменяются во всем диапазоне скоростей удара рис. 4.9(а-г).

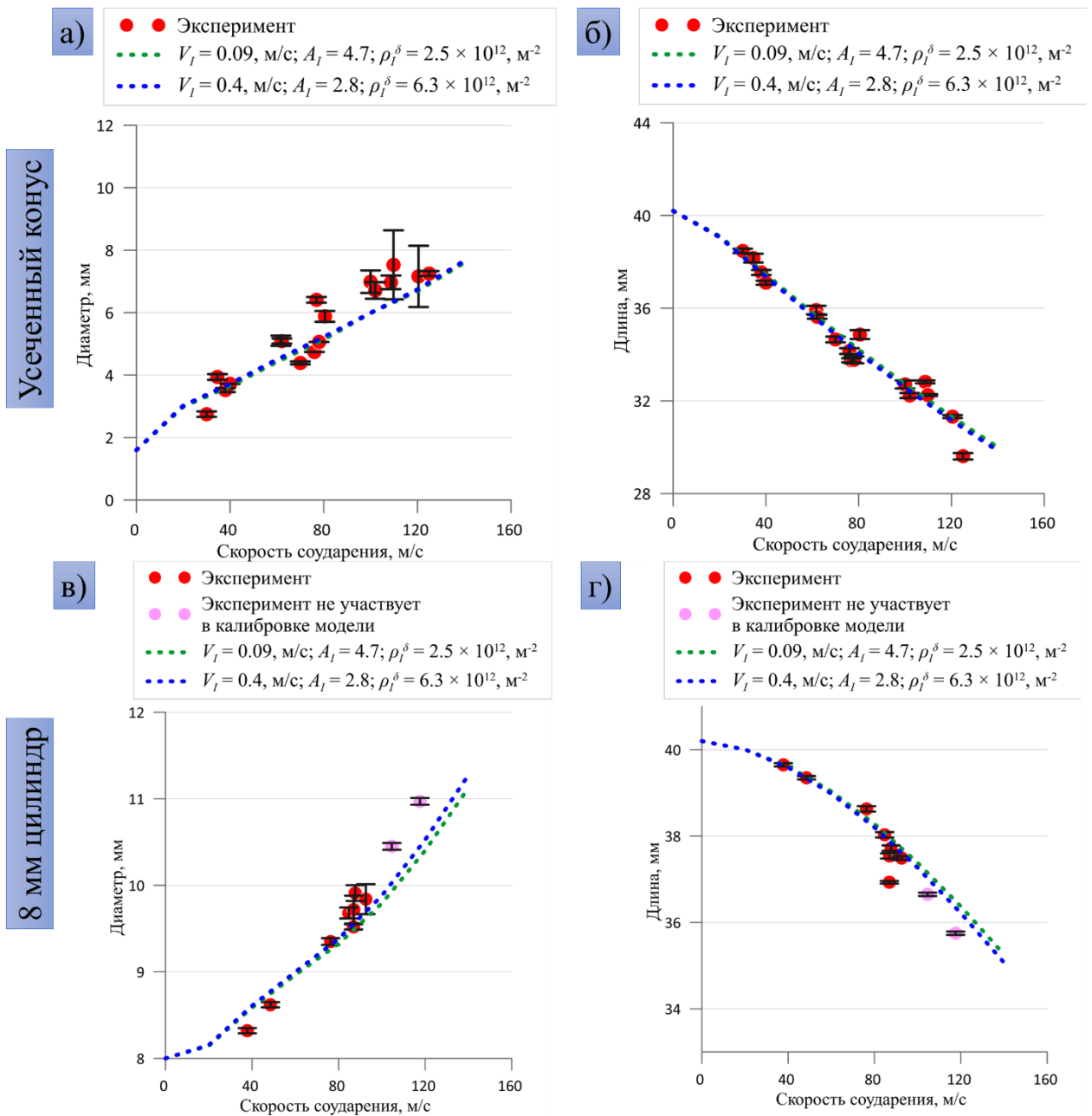


Рис. 4.7. Сравнение результатов трехмерной теоретической модели (SPH) с экспериментальными данными. Зависимости от скорости удара: (а) финального диаметра в плоскости соударения и (б) финальной длины в случае усеченного конуса; (в) финального диаметра в плоскости соударения и (г) финальной длины классического 8-мм цилиндра. Экспериментальные точки для двух самых высоких скоростей удара в (в, г) не использовались при калибровке параметров.

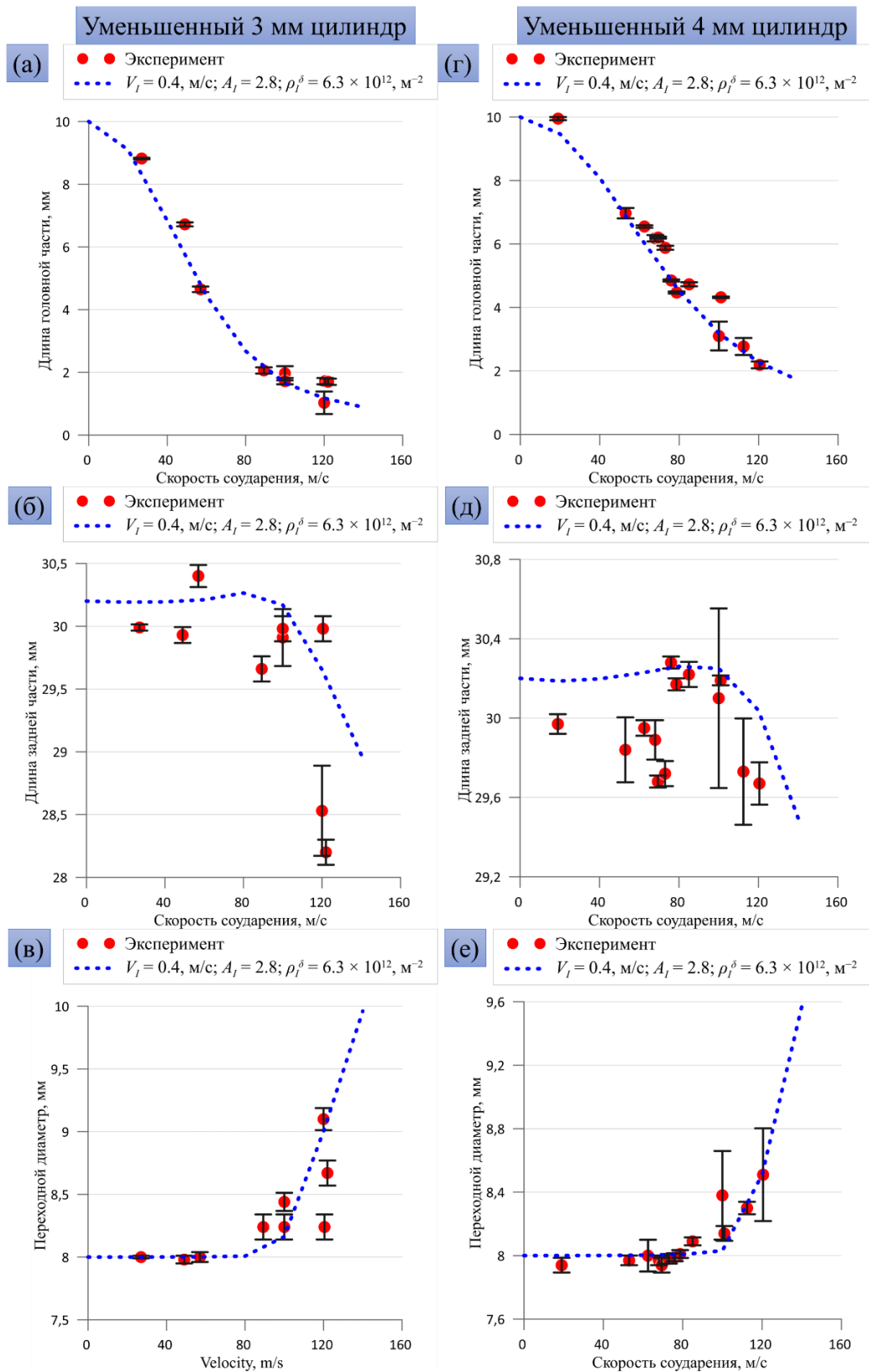


Рис. 4.8. Сравнение результатов трехмерной теоретической модели (SPH) с экспериментальными данными. Зависимости от скорости удара: (а,г) длины головной части ударника, (б,д) длины задней части ударника и (в,е) переходного диаметра для 3-мм цилиндра (а–в) и 4-мм цилиндра (г–е).

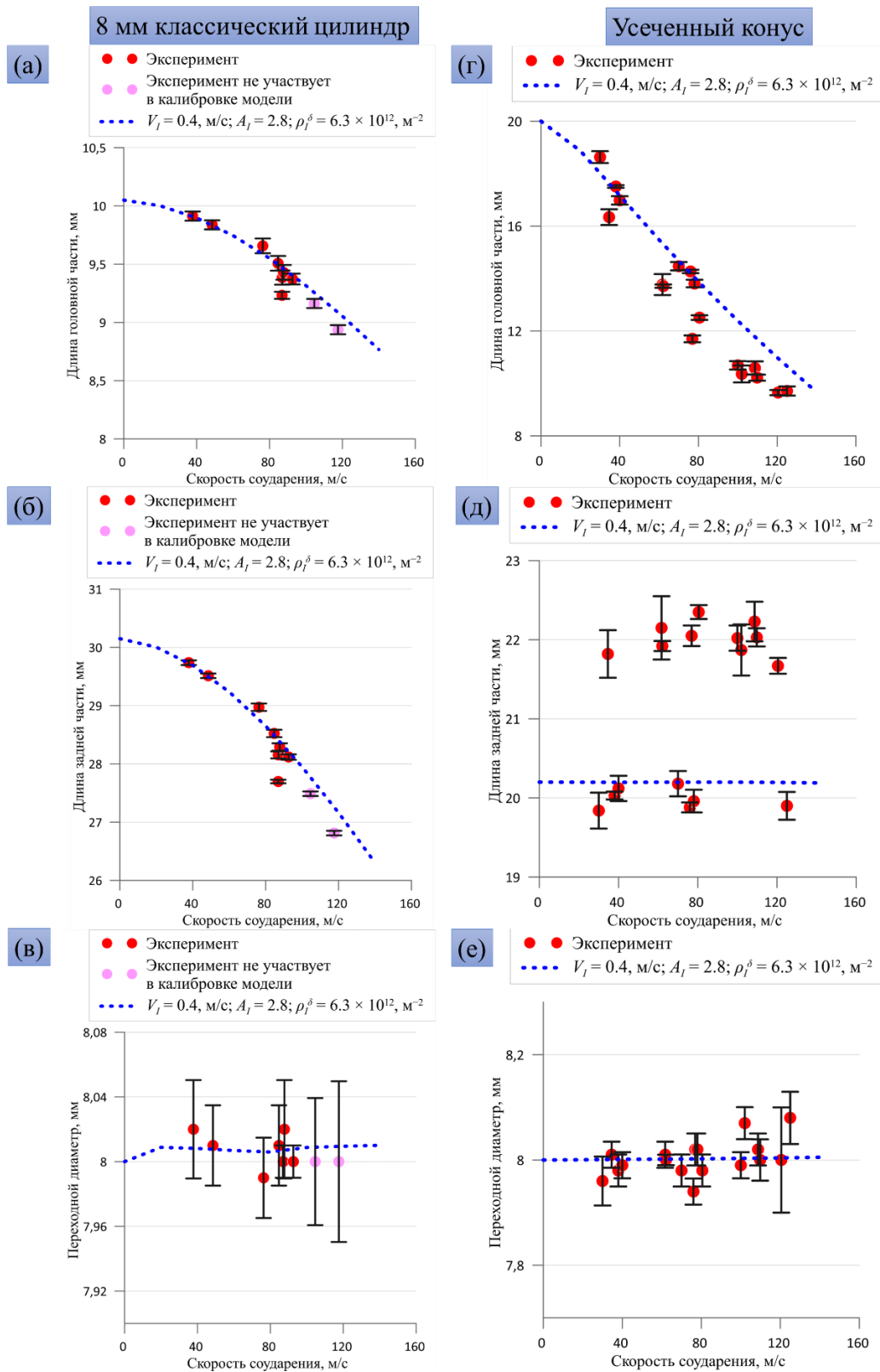


Рис. 4.9. Сравнение результатов трехмерной теоретической модели (SPH) с экспериментальными данными. Зависимости от скорости удара: (а,г) длины головной части ударника, (б,д) длины задней части ударника и (в,е) переходного диаметра для классического 8-мм цилиндра (а–в) и конуса (г–е).

4.2. Результаты теоретической модели для меди

В данном разделе представлены результаты моделирования по трехмерной теоретической модели с оптимальными параметрами, определенными в предыдущем разделе, для случая твердой холоднокатанной меди. Целью данного анализа является как сравнение результатов модели с экспериментами, так и выявление условий деформирования образцов. Сравнение финальной формы экспериментальных образцов с теоретической моделью показано на рис. 4.10 для всех исследованных форм ударников и для нескольких выбранных скоростей удара. Видно хорошее качественное соответствие результатов теоретической модели с экспериментом.

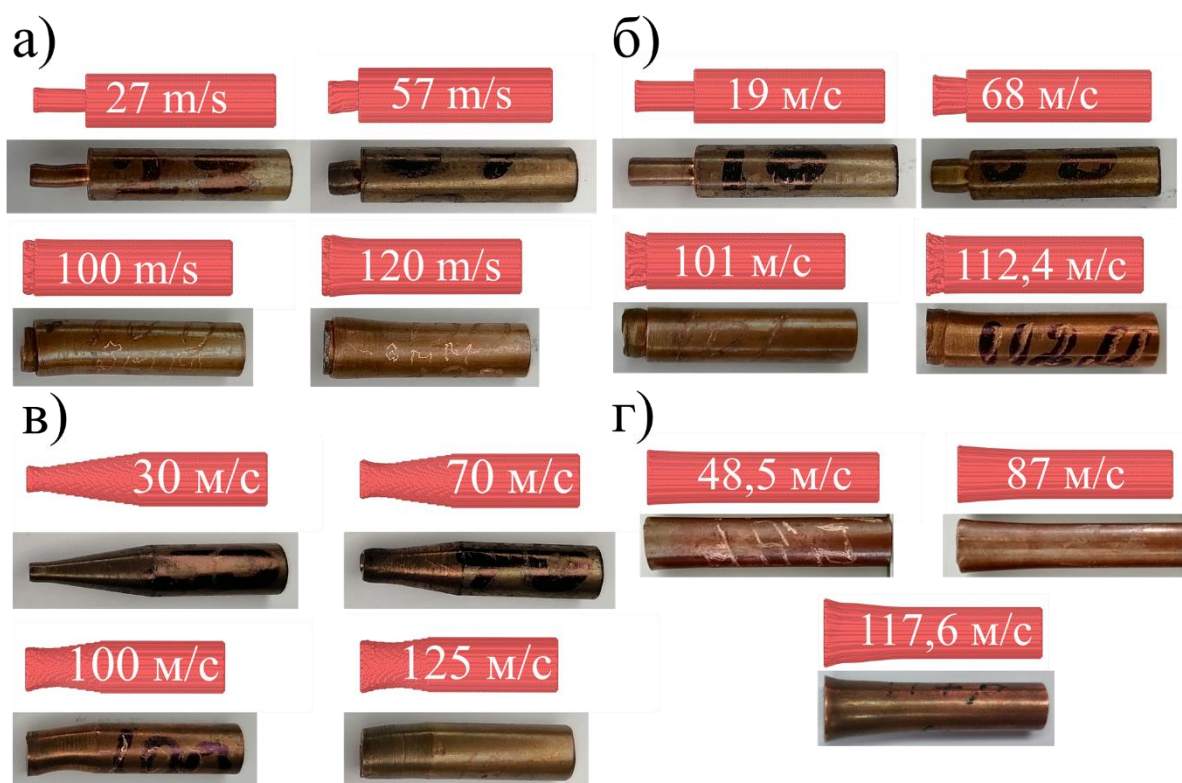


Рис. 4.10. Сравнение финальной формы образца после деформации для различных форм ударников: (а) уменьшенные 3-мм цилиндры; (б) уменьшенные 4-мм цилиндры; (в) усеченные конусы; (г) классические однородные 8-мм цилиндры.

4.2.1. Классический 8-мм цилиндр

Сравнение расчетной формы образца с экспериментальной для однородного 8-мм цилиндра представлено на рисунке 4.10. (г) и показывает типичную «грибовидную» деформацию цилиндров с увеличением скорости удара. На рис. 4.11(а) показана эквивалентная пластическая деформация w_M , которая является скалярной мерой тензора пластической деформации \mathbf{w} :

$$w_M = \sqrt{(2/3)(\mathbf{w}:\mathbf{w})}. \quad (4.2)$$

Пластическая деформация сосредоточена вблизи поверхности удара; к середине образца она уменьшается до нуля. В центре поверхности соударения значения пластической деформации максимальны, что коррелирует с микрофотографиями деформированного экспериментального образца: в экспериментальном образце наибольшее количество порообразных структур наблюдалось в областях наибольшей пластической деформации.

На рис. 4.11(б) показано распределение температуры в численном эксперименте. Наиболее высокие температуры получаются в центральной части ударной поверхности образца. Максимальное повышение температуры составляет около 160 К.

На рисунке 4.11. (в) показано пространственное распределение эквивалентного напряжения фон Мизеса σ_M , которое рассчитывается с помощью девиатора напряжения \mathbf{S} следующим образом:

$$\sigma_M = \sqrt{(3/2)(\mathbf{S}:\mathbf{S})} \quad (4.3)$$

и равно напряжению течения в случае пластического течения при простом растяжении или сжатии. После начала деформации наблюдается равномерное распределение напряжений почти в половине образца со значением 0,35–0,45 ГПа. Наибольшие напряжения наблюдаются на ударной поверхности. После остановки образца и дальнейшего отскока наблюдается резкое падение напряжения.

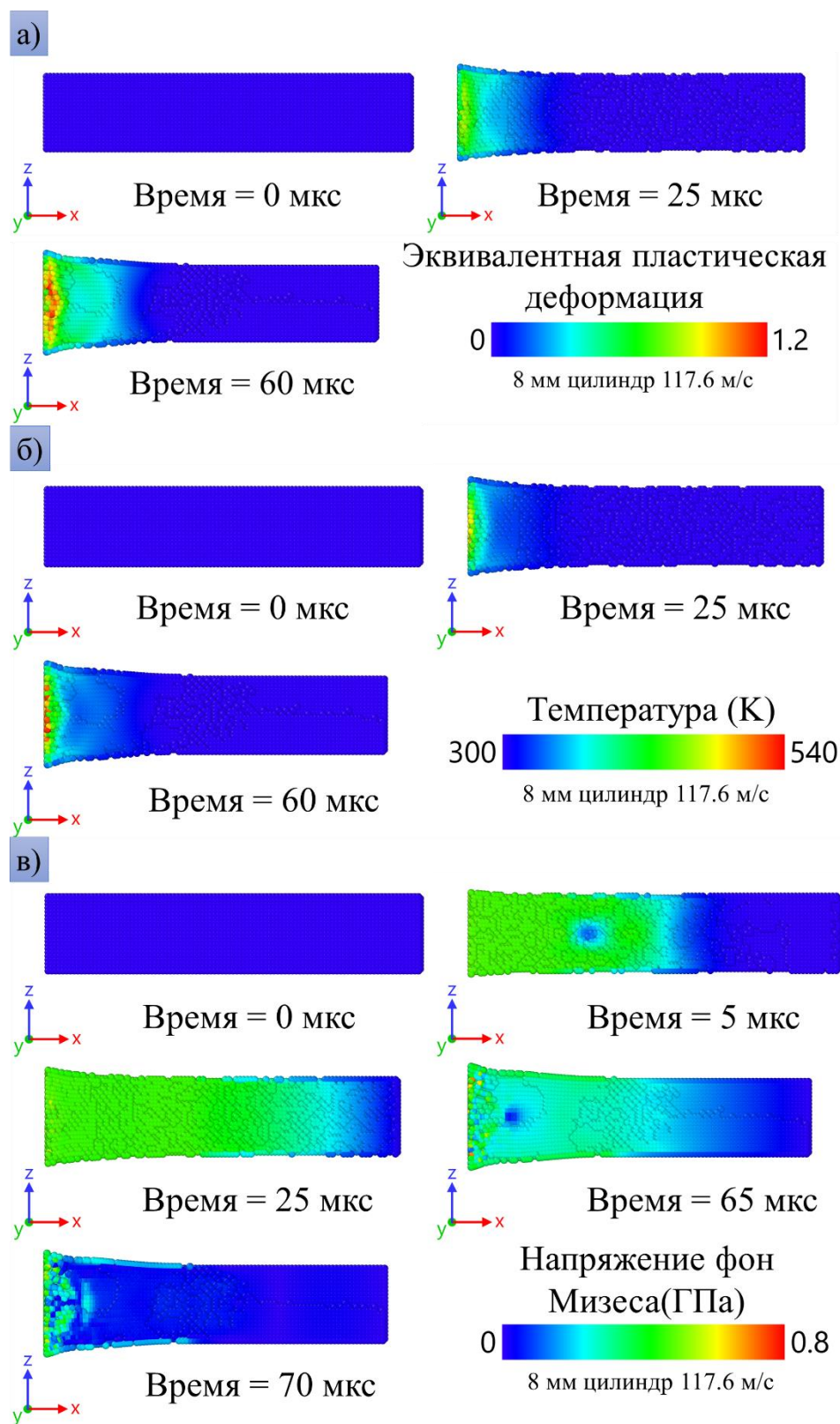


Рис. 4.11. Расчеты SPH для однородного 8-мм цилиндра, удар со скоростью 117,6 м/с: пространственное распределение (а) эквивалентной пластической деформации, (б) температуры и (в) эквивалентного напряжения фон Мизеса в центрально - поперечном сечении в последовательные моменты времени.

На рис. 4.15. (г) показано изменение во времени скорости радиальной деформации на плоскости соударения для 8-мм образца при скорости соударения 117,6 м/с. Данные получены численным расчетом. В начале скорость деформации достигает пикового значения $4 \cdot 10^4 \text{ с}^{-1}$, затем уменьшается с небольшими колебаниями до остановки образца; время остановки составляет около 70 мкс.

4.2.2. Уменьшенные цилиндры

На рис. 4.10. (а, б) сравниваются результаты теоретической модели и эксперимента для финальных форм медных ударников с головной частью в виде: (а) 3-мм уменьшенного цилиндра и (б) 4-мм уменьшенного цилиндра. Моделирование повторяет экспериментальную тенденцию укорочения головной части с почти недеформированной оставшейся частью, действующей как молоток. Степень укорочения увеличивается вместе с увеличением скорости удара одинаково как в эксперименте, так и в моделировании. Радиальное расширение близко к равномерному вдоль головной части, при этом наблюдается некоторая тенденция к формированию бочкообразного профиля, как и в эксперименте. На некоторых экспериментальных фотографиях наблюдается изгиб головной части, в то время как в данном моделировании изгиба нет. С другой стороны, при предварительном моделировании с менее сбалансированными (симметричными) численными моделями наблюдается изгиб. Можно сделать вывод, что существуют условия для неустойчивости в виде изгиба, и небольшая несоосность или нарушение баланса масс могут инициировать неустойчивость. При больших скоростях удара (более 100 м/с) для случаев уменьшенных 3-мм и 4-мм цилиндров деформация основной 8-мм части цилиндра наблюдается как в экспериментах, так и при численном моделировании.

На рис. 4.12 и 4.13 показаны эквивалентная пластическая деформация, распределение температуры и эквивалентного напряжения фон Мизеса, полученные в результате численного моделирования. Пластическая деформация в основном сосредоточена в области уменьшенного цилиндра, при этом значения пластической деформации в случае уменьшенного 3-мм цилиндра выше из-за меньшей площади поперечного сечения и, соответственно, больших напряжений при деформации. Распределение температуры аналогично распределению пластической деформации. Максимальные значения температуры составляют 980 К и 820 К для уменьшенных 3-мм и 4-мм цилиндров соответственно; средняя температура в деформированной части образца составляет около 650–700 К.

Напряжение по Мизесу в образцах достигает значения около 0,9 ГПа для случая уменьшенного цилиндра диаметром 3 и 4 мм. На рис. 4.12(в) и 4.13(в) видно, что в момент времени 50 мкс напряжение максимально в области перехода уменьшенных 3- и 4-мм цилиндров в 8-мм цилиндрическую часть. Это хорошо согласуется с результатами микроструктурного анализа, который показывает мелкие трещины (см. рис. 3.12) и крупные трещины вплоть до сквозных (см. рис. 3.13). Таким образом, можно говорить о хорошем согласии результатов численной модели с экспериментом.

На рис. 4.15(а) показана скорость радиальной деформации на поверхности соударения уменьшенного 3-мм цилиндра при скорости соударения 120 м/с. Данные получены численным расчетом. В начале скорость деформации достигает значения $9,6 \cdot 10^4 \text{ с}^{-1}$, затем деформация замедляется. После этого основной 8-мм цилиндр начинает давить на уменьшенный 3-мм цилиндр, скорость деформации резко возрастает до пикового значения $1 \cdot 10^5 \text{ с}^{-1}$, затем монотонно снижается до остановки образца; время остановки составляет примерно 120 мкс.

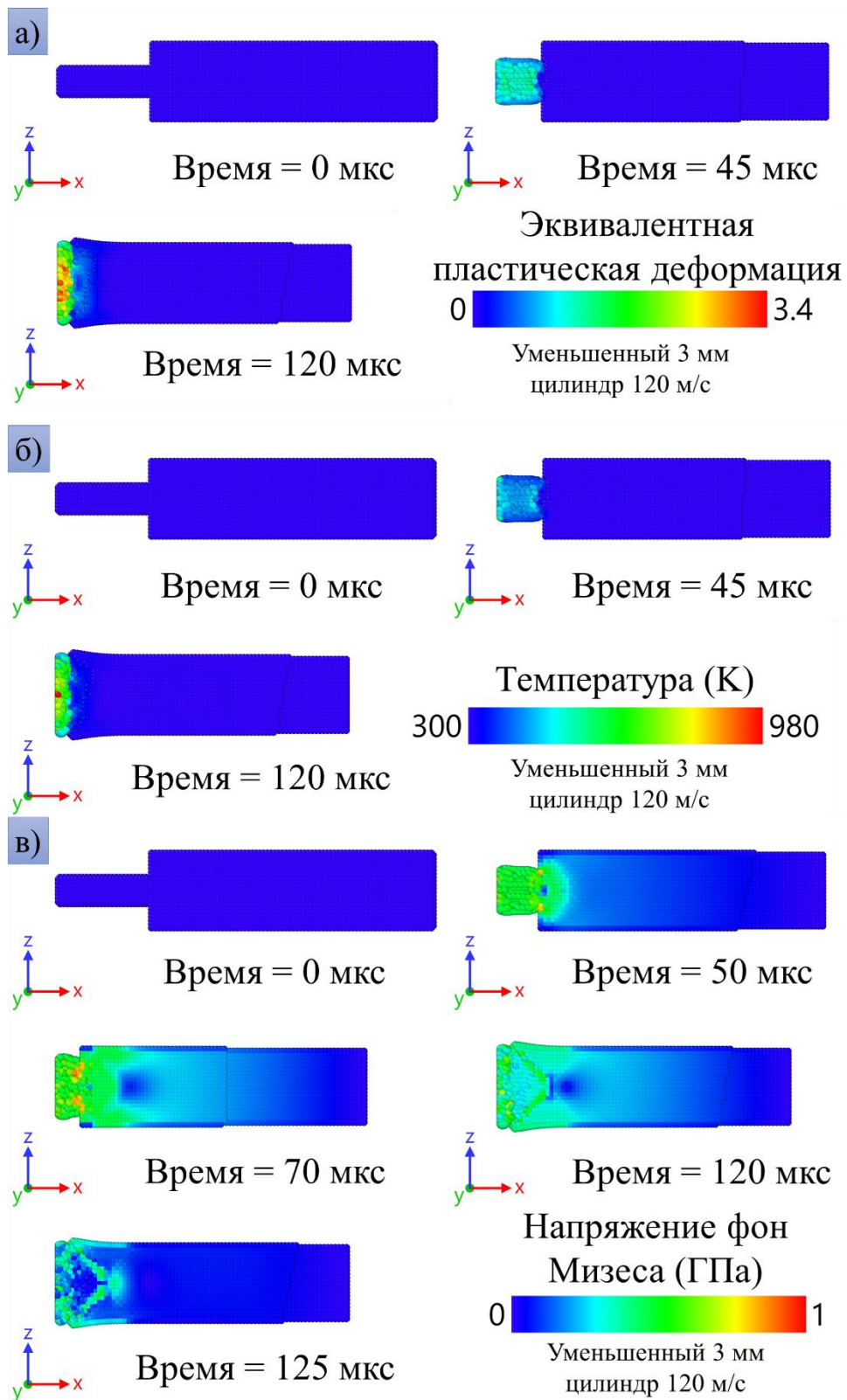


Рисунок 4.12. Расчеты SPH для уменьшенного 3-мм цилиндра при скорости удара 120 м/с. Пространственные распределения: (а) эквивалентной пластической деформации, (б) температуры и (в) эквивалентного напряжения фон Мизеса в центральном сечении в последовательные моменты времени.

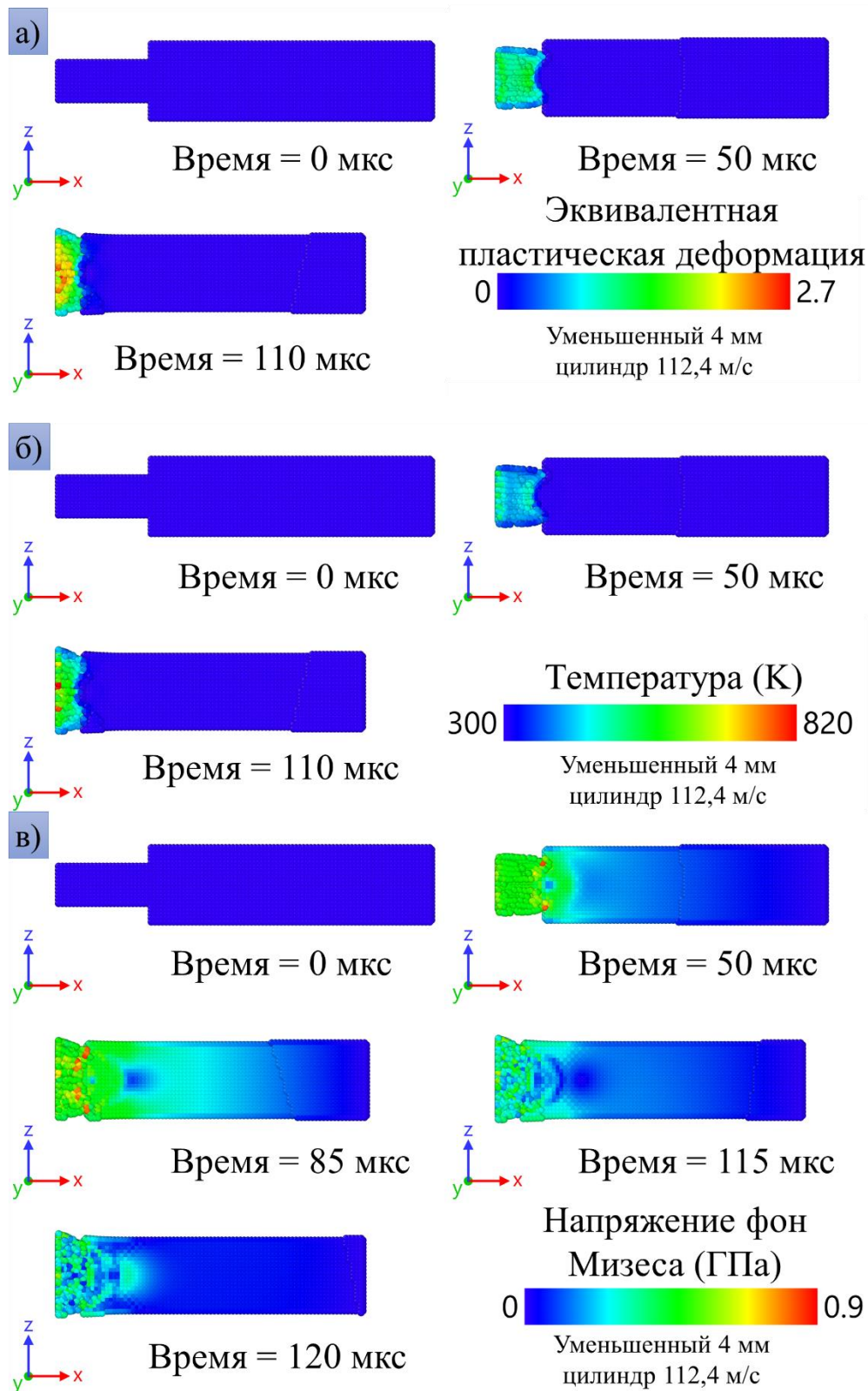


Рисунок 4.13. Расчеты SPH для уменьшенного 3-мм цилиндра при скорости удара 112,4 м/с: Пространственные распределения: (а) эквивалентной пластической деформации, (б) температуры и (в) эквивалентного напряжения фон Мизеса в центральном сечении в последовательные моменты времени.

Аналогичная ситуация наблюдается и для уменьшенного 4-мм цилиндра (см. рис. 4.15(б)). В начале скорость деформации достигает пикового значения $6,9 \cdot 10^4 \text{ с}^{-1}$. В момент начала давления основного 8-мм цилиндра на уменьшенный 4-мм цилиндр скорость деформации достигает значений $3,8 \cdot 10^4 \text{ с}^{-1}$, затем монотонно снижается до остановки образца; время остановки составляет примерно 110 мкс.

4.2.3. Усеченные конусы

Сравнение форм деформированных образцов представлено на рис. 4.10(в) и показывает преимущественное уплощение конусной части. На рис. 4.14(а) показано распределение пластической деформации в последовательные моменты времени. Пластическая деформация присутствует в основном в области контактной поверхности. Распределение температуры показано на рисунке 4.14. (б). Температура в деформированной области усеченного конуса составляет в среднем 650-750 К, максимальная температура около 1000 К, что еще далеко от температуры плавления меди. Распределение поля напряжений показано на рисунке 4.14. (в). Максимальное напряжение на контактной поверхности составляет около 1 ГПа, среднее для головной части образца около 0,7 ГПа.

На рис. 4.15(в) показана скорость радиальной деформации на ударной поверхности усеченного конуса, налетающего на препятствие со скоростью 125 м/с. В начале деформации скорость деформации достигает пикового значения $1 \cdot 10^5 \text{ с}^{-1}$, а затем колеблется на уровне около $0,8 \cdot 10^5 \text{ с}^{-1}$ практически до остановки. Время остановки составляет примерно 123 мкс, что совпадает со случаями уменьшенных цилиндров в головной части (рис. 4.15(а,б)) и примерно вдвое больше, чем в случае 8-мм цилиндра (рис. 4.15(г)).

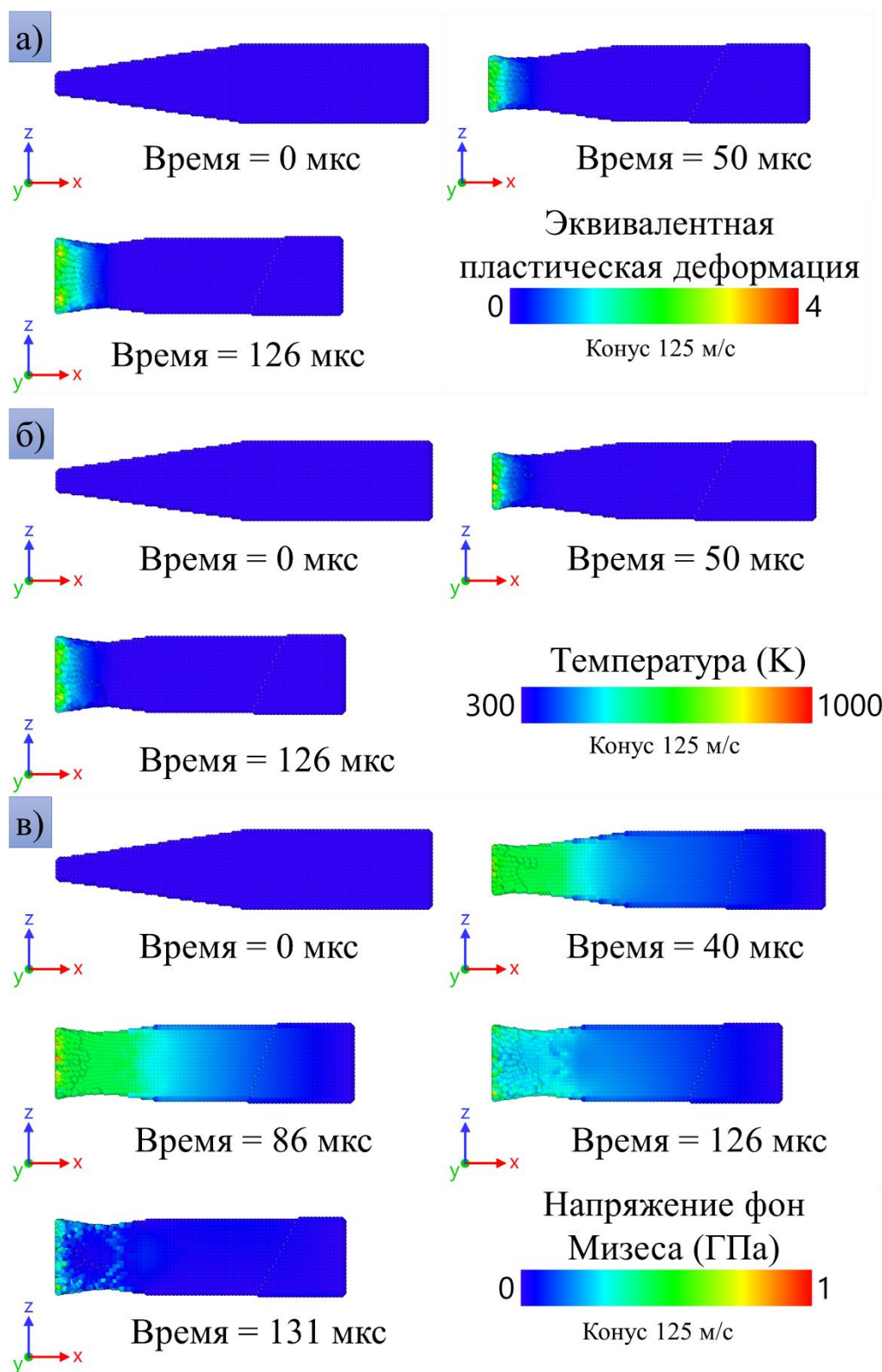


Рисунок 4.14. Расчеты SPH для усеченного конуса в головной части при скорости удара 125 м/с: Пространственные распределения (а) эквивалентной пластической деформации, (б) температуры и (в) эквивалентного напряжения фон Мизеса в центральном сечении в последовательные моменты времени.

4.2.4. Скорость деформации при ударе

На рис. 4.15 сравниваются рассчитанные скорости радиальной деформации для всех форм образцов, достигаемые при максимальных экспериментальных скоростях удара. Эти скорости деформации рассчитываются из результатов трехмерной модели (SPH) путем деления скорости изменения среднего радиуса на текущий средний радиус пятна контакта между образцом и наковальней. Радиальная деформация этого пятна контакта выбрана для анализа как наиболее экстремальный деформационный процесс при ударе. Максимальная скорость деформации варьируется от примерно $4 \cdot 10^4 \text{ с}^{-1}$ для классического цилиндра Тейлора на рис. 4.15(г) до примерно 10^5 с^{-1} для уменьшенного 3-мм цилиндра и усеченного конуса на рис. 4.15(а,в). Самые высокие скорости деформации близки к тем, которые наблюдаются в экспериментах по столкновению пластин, но достигнутые деформации на порядок выше (радиальная истинная деформация достигает значения около 1, как можно оценить из рис. 4.6. и 4.7.). Таким образом, предлагаемые профилированные образцы позволяют легко получить экспериментальную информацию об одновременно больших деформациях и высоких скоростях деформации. Профилирование цилиндров увеличивает напряжения и деформации в головной части.

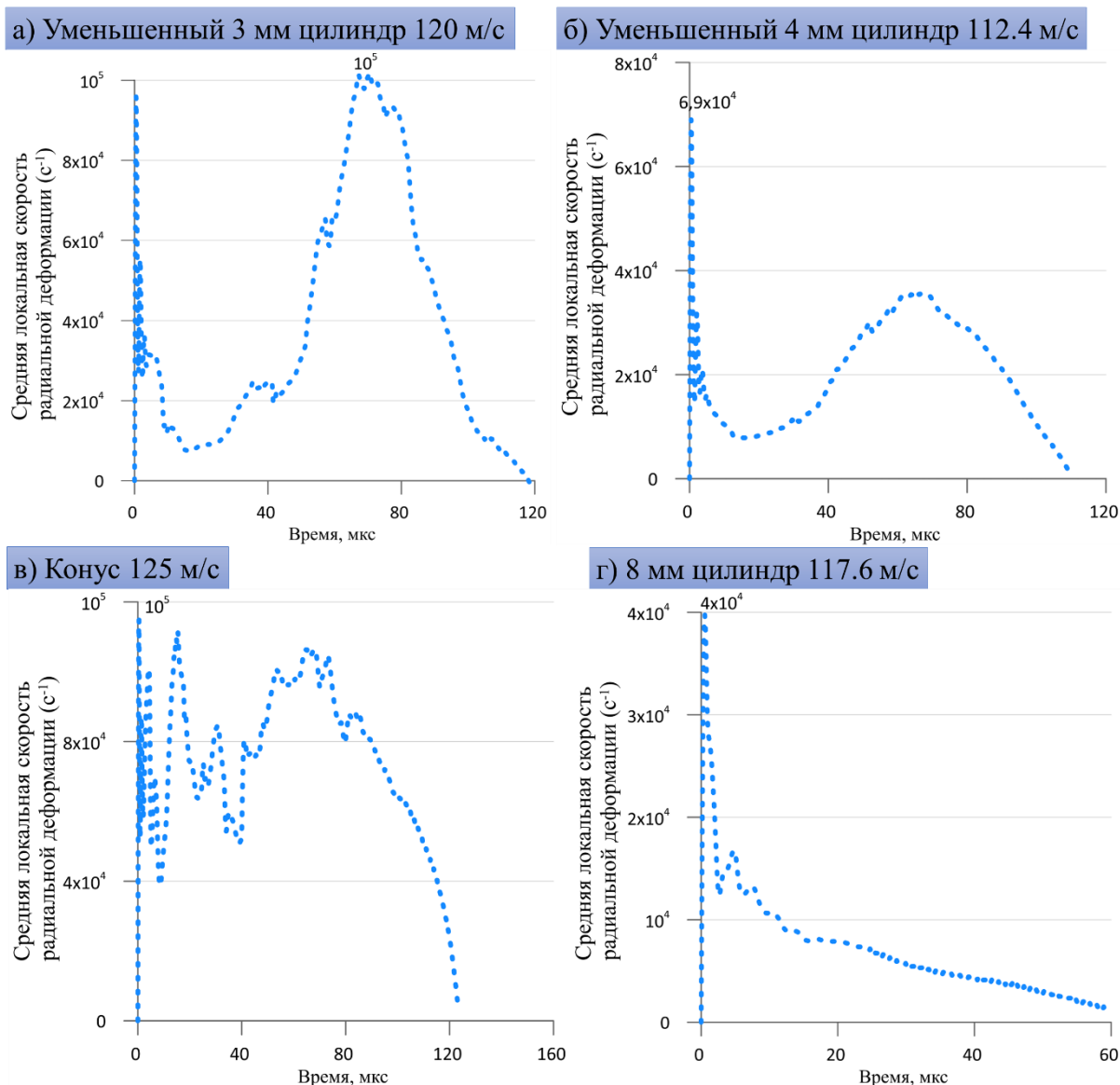


Рис. 4.15. Временная эволюция скорости радиальной деформации для: (а) уменьшенного 3-мм цилиндра при скорости удара 120 м/с; (б) уменьшенного 4-мм цилиндра при скорости удара 112,4 м/с; (с) усеченного конуса при скорости удара 125 м/с; (г) однородного 8-мм цилиндра при скорости удара 117,6 м/с.

4.2.5. Оценка измельчения зерен и ослабленных участков (порообразных структур)

На рис. 4.16 и 4.17 представлены результаты численного расчета пространственного распределения диаметра зерна и объемной доли ослабленных участков (порообразных структур) в образцах твердой

холоднокатанной меди после деформации на примере уменьшенного 3-мм цилиндра при ударе со скоростью 122 м/с (рис. 4.16(а) и 4.17(а)) и классического 8-мм цилиндра при ударе со скоростью 86,9 м/с (рис. 4.16(б) и 4.17(б)). Соответствующие экспериментальные образцы исследовались методом оптической микроскопии (см. раздел 3.3.1). Численный расчет основан на уравнениях (2.22) и (2.24), дополняющих модель дислокационной пластичности.

В случае уменьшенного цилиндра численное моделирование предсказывает сильное измельчение зерна с уменьшением диаметра зерна примерно до 0,7 мкм в деформированной головной части (рис. 4.16. (а)). Это хорошо согласуется с результатами микроструктурного анализа, представленными на рис. 4.16 (в): размер зерна вблизи ударной поверхности составляет менее 2 мкм, что является порогом разрешения для используемой оптической микроскопии. Толщина зоны измельченных зерен также совпадает для эксперимента, рис. 4.16(в), и моделирования, рис. 4.16(а). Начальный диаметр $d_0 = d(t=0) \approx 18 \mu\text{m}$ берется из экспериментальных данных для исходного материала

В случае 8-мм образца при скорости удара 86,9 м/с минимальный размер зерна в деформированной области при численном расчете составляет 5 мкм (рис. 4.16(б)). По результатам микроскопических исследований экспериментальных образцов для классических цилиндров обнаружено более сильное измельчение вблизи плоскости удара с преобладанием зерен размером менее 2 мкм, но с сохранением части крупных зерен размером 17 мкм, близком к исходному. В то же время, на расстоянии 3 мм от плоскости удара преобладают конгломераты зерен со средним размером 7 мкм, что согласуется с численными результатами; сравните рис. 4.16(б) и 4.16(г). В целом, предложенная теоретическая оценка измельчения зерна не противоречит экспериментальным данным.

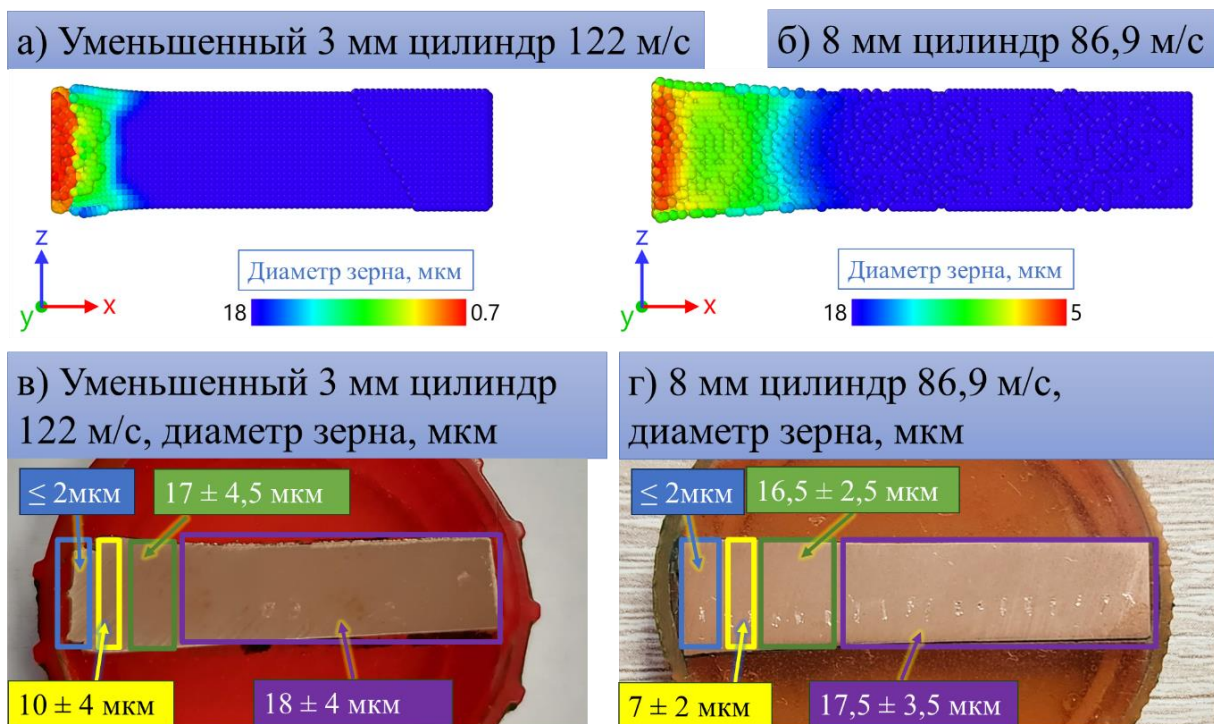


Рис. 4.16. Рассчитанный по теоретической модели диаметр зерна в твердом медном ударнике для: (а) уменьшенного цилиндра 3 мм при скорости удара 122 м/с и (б) цилиндра 8 мм при скорости удара 86,9 м/с в сравнении с экспериментальными данными (в) и (г), соответственно.

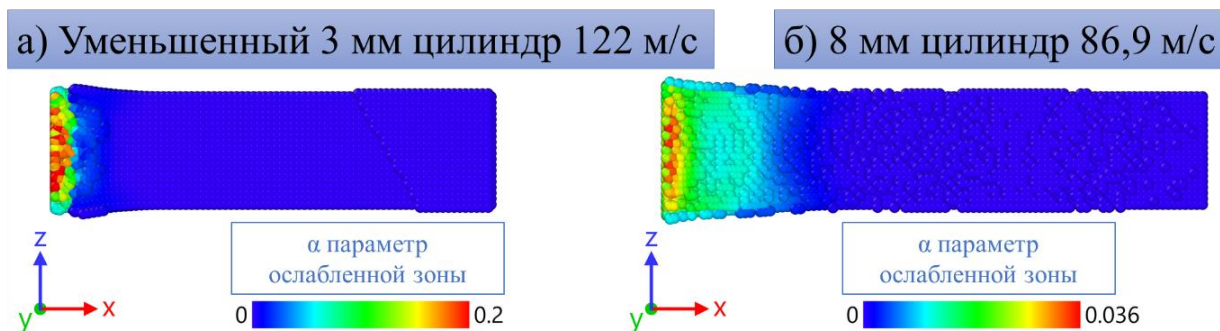


Рис. 4.17. Рассчитанная объемная доля ослабленных участков (порообразных структур) в медном ударнике для: (а) уменьшенного 3-мм цилиндра при скорости удара 122 м/с и (б) 8-мм цилиндра при скорости удара 86,9 м/с.

Что касается объемной доли α ослабленных участков (порообразных структур), то можно ожидать соответствия по порядку величины. Согласно численному моделированию с помощью уравнения (2.24), максимальная объемная доля составляет 35 % (порядка десятков процентов) для случая 3-

мм уменьшенного цилиндра и 3,6 % (порядка нескольких процентов) для случая классического 8-мм цилиндра. Экспериментальное значение колеблется от 10% до 53% в первом случае и составляет около 7,5% во втором случае, что коррелирует с численными предсказаниями, по крайней мере, по порядку величины. Экспериментальные значения оценивались по оптическим микроскопическим изображениям площадей протравленных сечений размером $0,5 \times 0,5$ мм² с расчетом площади пор и пересчетом в объемную долю. При экспериментальном анализе учитывались все порообразные структуры и полосы локализации, но при этом старались избегать зон с трещинами. Для уменьшенного 3-мм цилиндра рассчитана экспериментальная α как вблизи плоскости удара, так и в области перехода от уменьшенного 3-мм цилиндра к основной 8-мм части между трещинами. В случае классического 8-мм цилиндра исследовалась только область вблизи поверхности удара, так как по мере удаления от нее количество ослабленных зон уменьшается за счет меньшей величины пластической деформации.

Для отожженных медных образцов была выполнена аналогичная оценка измельчения зеренной структуры с использованием модели каскада энергии. Сравнение изменения размера зерна в теоретической модели и эксперименте показано на рис. 4.18. Начальный диаметр $d_0 = d(t=0) \approx 290$ мкм берется из экспериментальных данных для исходного материала. Предложенная модель измельчения зерна с хорошей точностью описывает изменение размеров вблизи ударной поверхности. В численном расчете повторяется тенденция измельчения размера зерна на большей протяженности по сравнению с холоднокатанными образцами. Толщина зоны измельченных зерен также хорошо коррелирует с экспериментом.

В целом, предложенная модель измельчения зеренной структуры и роста порообразных структур не противоречит экспериментальным данным, что доказывает ее адекватность.

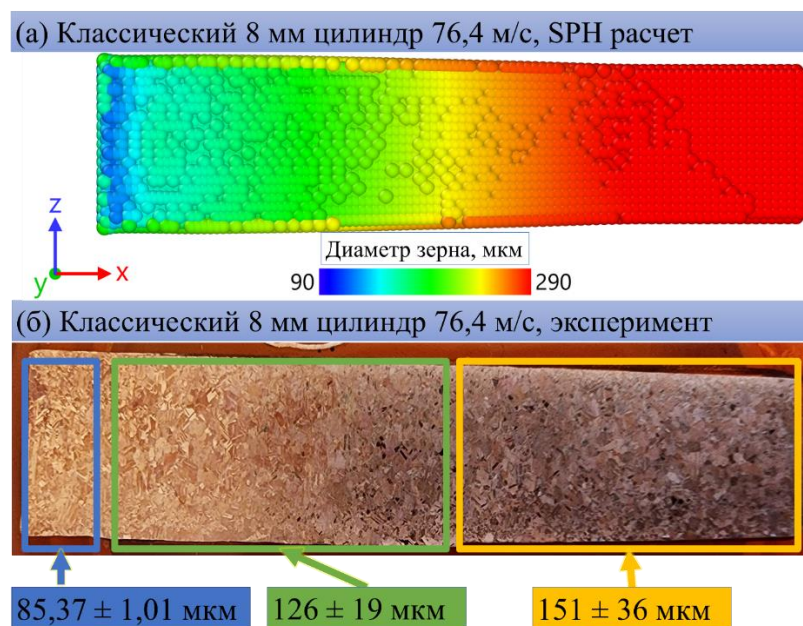


Рис. 4.18. Рассчитанный по теоретической модели диаметр зерна отожженном в медном ударнике для 8 мм цилиндра при скорости удара 76,4 м/с (а) в сравнении с экспериментальными данными (б).

4.2.6. Влияние трения на финальную форму образца

В данном разделе исследуется влияние трения между образцом и наковальней на форму после высокоскоростного соударения. На рис. 4.19. сравнивается форма экспериментального образца с численным экспериментом с различными коэффициентами трения в случае 8-мм цилиндра при скорости удара 117,6 м/с. На рис. 4.20. показана зависимость конечного диаметра ударного сечения от коэффициента трения для численных расчетов; для удобства на графике также указан диаметр экспериментального образца. Наилучшее соответствие формы и диаметра образца после удара получается при нулевом трении; параметризация с учетом трения не целесообразна, поскольку форма образца в численной модели с трением качественно отличается от эксперимента. Это можно объяснить тем, что в опытах образцы смазывались WD-40 для уменьшения трения при ускорении и при ударе.

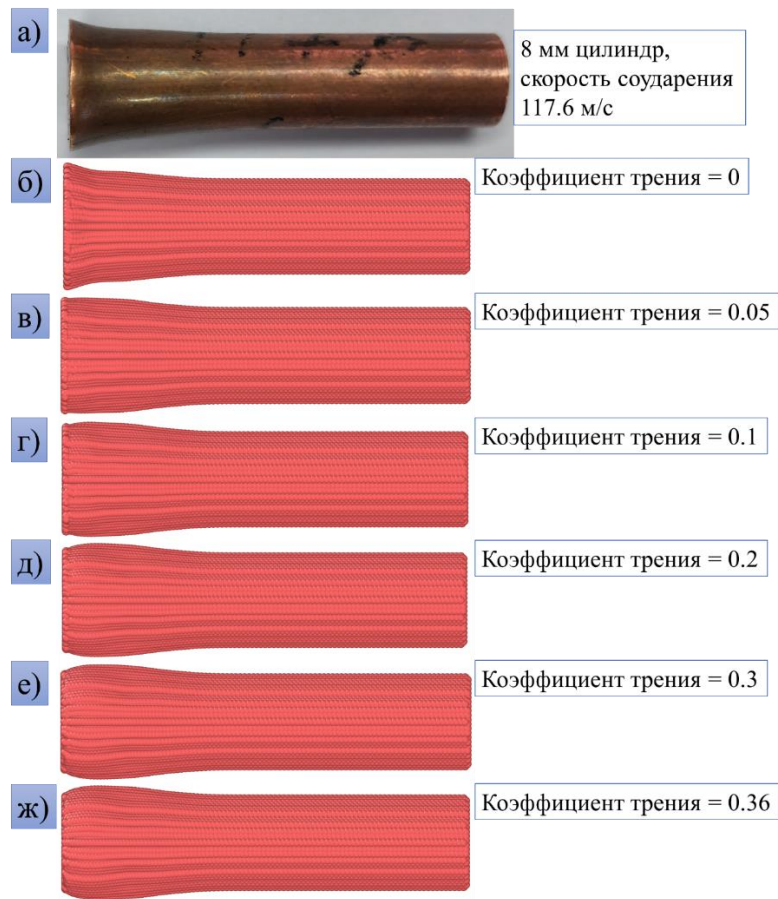


Рис. 4.19. Влияние коэффициента трения на форму образца.

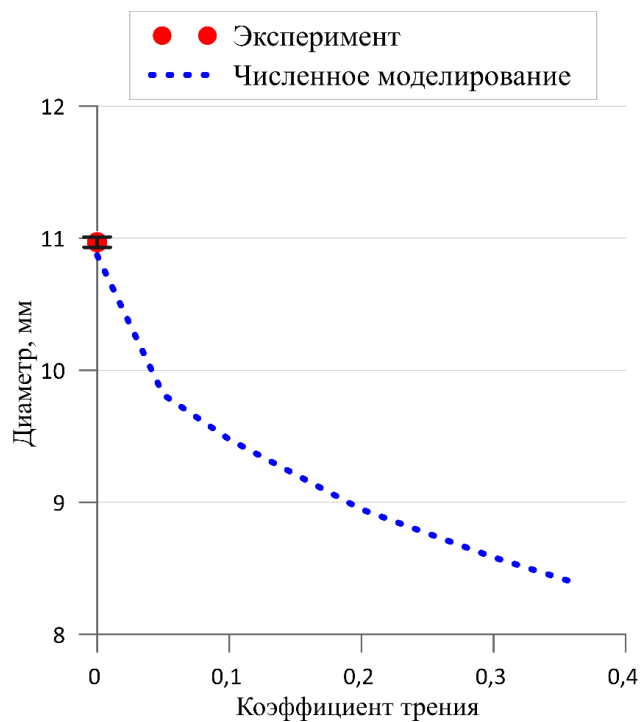


Рис. 4.20. Влияние коэффициента трения на финальный диаметр образца для 8-мм цилиндра при скорости удара 117,6 м/с.

4.2.7. Сравнение с экспериментами по метанию пластин

Параметризованная модель (см. пункт 4.1) сравнивается с результатами экспериментов с плоскими ударниками [152] при комнатной температуре. В этих экспериментах ударные образцы были изготовлены из меди ГЦК марки М1 и отожжены в вакууме при 445 °С в течение 20 мин; поэтому ожидается, что начальная плотность дислокаций будет значительно ниже, чем в холоднокатаных образцах, использованных для определения параметров теоретической модели. Медные образцы имели толщину около 2,47 мм и подвергались удару медной пластинки толщиной 0,56 мм со скоростью в диапазоне 150 – 355 м/с. В эксперименте перпендикулярные размеры пластин обеспечивают одноосные деформированные состояния (плоская ударная волна) в интересующей области в середине пластин в период регистрации. Для получения аналогичных условий в нашей трехмерной модели взаимодействующая система представлена сильно вытянутым параллелепипедом из 5x6x500 SPH частиц с длинной стороной вдоль направления удара и ограничением движения частиц в перпендикулярных направлениях. Рис. 4.21. сравнивает наши рассчитанные истории скорости свободной поверхности с экспериментальными данными [152] для трех скоростей удара. Как и следовало ожидать, расчеты с высокой начальной плотностью дислокаций $\rho_1^\delta(t=0) = 6.3 \cdot 10^{12} \text{ м}^{-2}$ в каждой системе скольжения (всего $0.8 \cdot 10^{14} \text{ м}^{-2}$ во всех 12 системах скольжения), оптимизированные для наших холоднокатаных образцов, завышают как упругий предвестник, так и волну упругой разгрузки (первое падение скорости за максимумом) как показано на рисунке 4.21(а). В то же время уменьшение этого параметра до $\rho_1^\delta(t=0) = 10^{11} \text{ м}^{-2}$ в каждой системе скольжения ($1.2 \cdot 10^{12} \text{ м}^{-2}$ в сумме) при сохранении всех остальных параметров модели дает разумное соответствие между теоретической моделью и экспериментами по форме ударного фронта и волны разгрузки,

как показано на рис. 4.21(б). Параметр $\rho_1^\delta(t=0)$ характеризует исходное деформированное состояние материала; следовательно, он должен различаться между предварительно деформированными и отожженными образцами. Значение плотности дислокаций вплоть до 10^{11} м^{-2} может наблюдаться в отожженных материалах [150], в то время как значение порядка 10^{14} м^{-2} характерно для деформированных материалов.

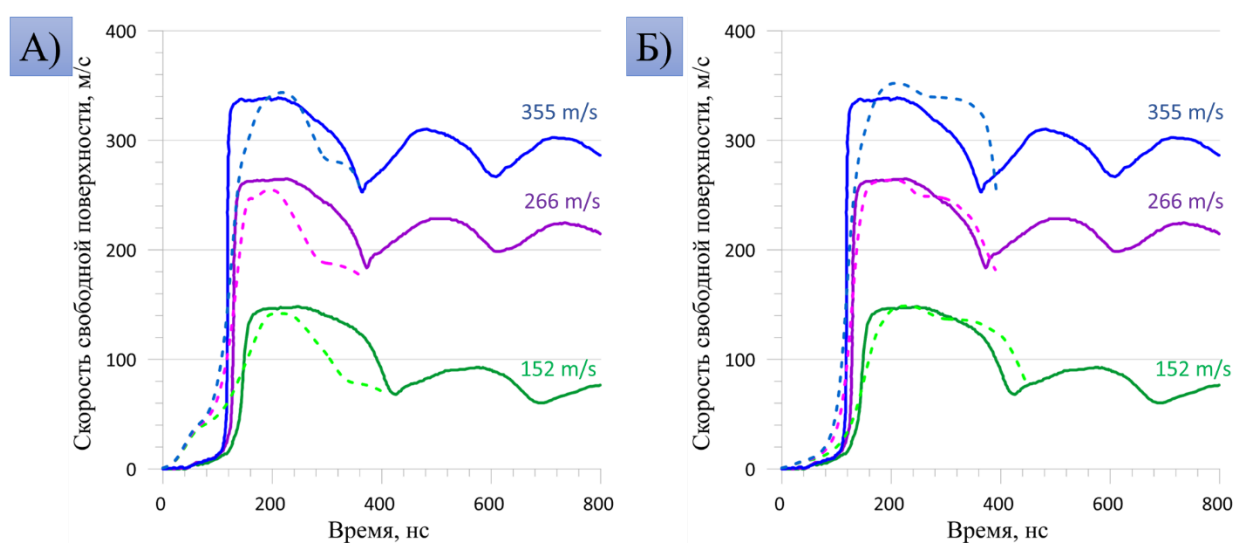


Рисунок 4.21. Сравнение результатов теоретической модели экспериментальными данными [152] для высокоскоростного соударения пластин: истории скорости свободной поверхности для скоростей удара 152, 266 и 355 м/с, где экспериментальные данные представлены сплошными линиями, а расчетные данные представлены пунктирными линиями. Расчет с оптимизированными параметрами, показанными в таблице 2.1. (в частности, $\rho_1^\delta(t=0) = 6.3 \cdot 10^{12} \text{ м}^{-2}$ в каждой системе скольжения), показан на панели (а), а расчет с уменьшенной начальной плотностью иммобилизованных дислокаций $\rho_1^\delta(t=0) = 10^{11} \text{ м}^{-2}$ показан на панели (б). Расчетные данные обрезаны по моменту времени первого откольного импульса в экспериментах, поскольку откольное разрушение не учитывается в настоящем моделировании.

4.2.8. Расчеты для отожженных медных образцов

Как уже было ясно из результатов экспериментов по динамическому соударению и из микроструктурного анализа отожженных медных ударников, свойства металла существенно изменились, сделав его более мягким. Для SPH расчетов было принято решение снизить плотность иммобилизованных дислокаций в каждой системе скольжения до $\rho_1^\delta(t=0) = 10^{11} \text{ м}^{-2}$ аналогично предыдущему пункту. Таким образом, начальные плотности подвижных и неподвижных дислокаций сравнялись. Стоит отметить, что остальные параметры модели, такие как: коэффициент упрочнения A_l и скорость иммобилизации дислокаций V_l , полученные с помощью статистического метода Байеса, остались неизменными. Для SPH расчетов были скорректированы геометрические параметры образца с учетом того, что при проведении отжига в среднем 0,25 мм верхнего слоя меди с каждой стороны перешло в нагар на поверхности образца. Число частиц в SPH расчете при этом немного уменьшилось для каждой из форм ударников. На рис. 4.22 показано сравнение экспериментальных данных и результатов теоретической модели для: (а,б) – классического 8-мм цилиндра, (в,г) – усеченного конуса, (д,е) – профилированного 4-мм цилиндра, результаты расчетов представлены черной пунктирной линией. В качестве геометрических параметров для сравнения представлены изменение длины и диаметра образца в головной части по отношению к их начальным значениям. В случае изменения диаметра головной части 8-мм классического цилиндра (рис. 4.22(а)) предсказание модели несколько превышает значения эксперимента, однако стоит отметить, что изменение диаметра для этой формы образцов незначительно и не превышает 1,6 мм, т.е. предсказание модели превышает экспериментальные данные на десятые доли миллиметра, что в рамках геометрии образца незначительно. Стоит отметить, что существуют эксперименты, в которых погрешность изменения диаметра

головной части образца профилированных цилиндров достаточно большая. Это связано с тем, что после процедуры отжига размер зерна существенно увеличивается. При этом на головную часть отожженных образцов может приходиться всего несколько крупных зерен. Подобная структура может приводить к локализации пластической деформации на границах зерен, что может нарушать цилиндрическую симметрию образцов, в качестве примера показана ударная поверхность усеченного конуса на рисунке 4.23 (г). Подобное явление менее выражено на классических 8 мм образцах, так как на ударной поверхности сосредотачивается большое количество зерен.

На рис. 4.23(а-в) показано сравнение формы экспериментального образца с SPH расчетами. В случае классического 8-мм цилиндра, рис. 4.23(а), модель хорошо описывает увеличение диаметра образца практически по всей его длине. В случае 4 мм уменьшенного цилиндра, рис. 4.23(б), и усеченного конуса, рис. 4.23(в), результаты численного моделирования предсказывают деформацию не профилированной части цилиндра, хорошо согласуясь с экспериментальными результатами.

В целом, модель, которая ранее была параметризована для холоднокатанных медных цилиндров, с хорошей точностью описывает экспериментальные результаты для отожженных образцов. Для этого потребовалось изменить только один параметр модели, а именно начальную плотность иммобилизованных дислокаций, что физически обоснованно. Полученные результаты доказывают адекватность разработанной трехмерной теоретической модели и предложенного метода параметризации.

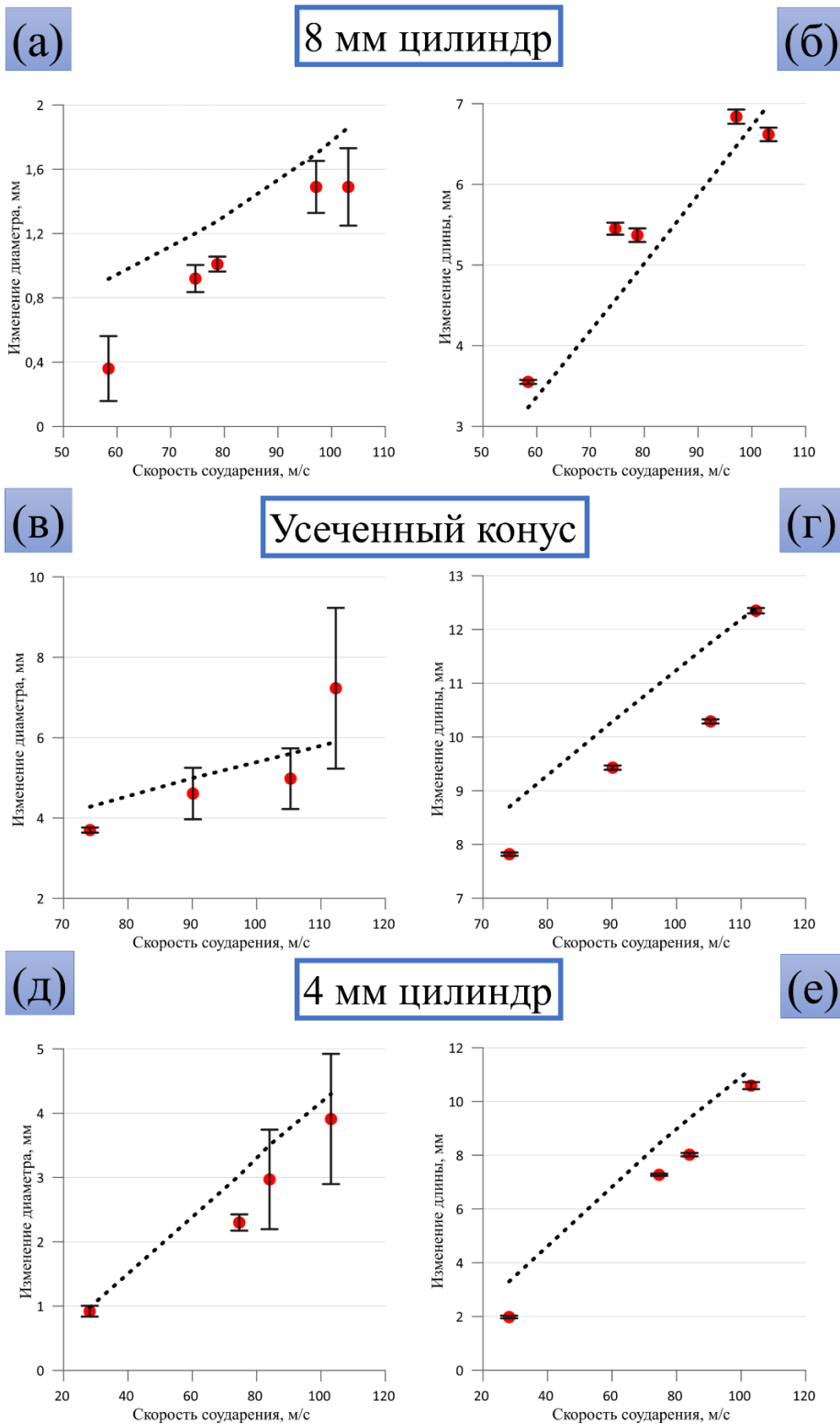


Рис. 4.22. Сравнение результатов трехмерной теоретической модели с экспериментальными данными для образцов из отожженной меди. Зависимости от скорости удара: (а,в,д) изменение диаметра и (б,г,е) изменение длины для (а,б) 8-мм классического цилиндра, (в,г) усеченного конуса и (д,е) 4-мм профилированного цилиндра.



Рис. 4.23. Сравнение финальной формы образца после деформации для различных форм ударников: (а) однородный 8-мм цилиндр; (б) уменьшенный 4-мм цилиндр; (в) усеченный конус; (г) фотография ударной поверхности усеченного конуса с нарушением осевой симметрии.

4.3. Параметризация для случая латунных образцов

В данном разделе проводится параметризация теоретической модели для случая латунных образцов аналогично предыдущим разделам работы. Предварительная попытка параметризовать модель с тем же набором разыгрываемых параметров, как и в случае меди $\{\rho_i^\delta(t=0), A_i, V_i\}$ показала, что учет такого количества переменных не способен с удовлетворительной точностью описать деформацию латунных ударников. Стоит отметить, что на небольших скоростях соударения (до 50 м/с) изменение геометрических размеров латунных ударников оказалось схожее с медными образцами, но при увеличении скорости соударения (в диапазоне 50 - 100 м/с) наблюдается

большая прочность (меньшая деформация) латунных ударников по сравнению с медными, а при превышении скорости удара 100 м/с латунные ударники начинают разрушаться. Для более точного теоретического описания пластической деформации латунных ударников был расширен список оптимизируемых коэффициентов модели дислокационной пластичности: $\{\rho_I^\delta(t=0), A_I, V_I, F_{mp}, k_a, k_D\}$, где F_{mp} - коэффициент трения образца о преграду, k_a - коэффициент аннигиляции дислокаций, k_D - коэффициент генерации дислокаций, остальные параметры также взяты из предыдущей литературы, см. Таблицу 2.1. Латунь является менее пластичным металлом, чем медь, это приводит к тому, что изменение диаметра ударника меньше, чем в случае медных образцов, при этом «бочкообразность» деформированных профилированных 4 мм цилиндров сохраняется. Это побуждает ввести учет коэффициента трения F_{mp} для более точного описания формы деформированного ударника. Учет коэффициента аннигиляции k_a и генерации k_D дислокаций необходим, ведь упрочнение ударников напрямую зависит от этих коэффициентов. Коэффициент аннигиляции k_a должен быть ниже, чем в медных ударниках, что позволит аннигилировать меньшее количество дислокаций в металле, соответственно увеличит их плотность в деформированной части. Коэффициент генерации k_D дислокаций позволит быстрее накапливать плотность дислокаций в деформированном образце.

4.3.1. ИНС-эмулятор для латунных образцов

С использованием трехмерной теоретической модели была подготовлена база данных для обучения ИНС (11500 результатов) и проверочная база данных для валидации точности обучения ИНС (1300 результатов). На вход ИНС поступают восемь значений: $\{V_x, \Psi, \rho_I^\delta(t=0), A_I, V_I, F_{mp}, k_a, k_D\}$, где V_x - скорость удара, Ψ - код формы образца (0 для однородного 8-мм цилиндра,

1 для уменьшенного 4-мм цилиндра, 2 для уменьшенного 3-мм цилиндр и 3 для усеченного конуса), $\rho_I^\delta(t=0)$ – начальная плотность иммобилизованных дислокаций в каждой системе скольжения, A_I – коэффициент упрочнения, V_I – скорость иммобилизации, F_{mp} – коэффициент трения, k_a – коэффициент аннигиляции дислокаций, k_D – коэффициент генерации дислокаций. Выход ИНС содержит следующие значения: изменение диаметра и длины образца в результате соударения. Входные параметры воспроизводились случайным образом с равномерным распределением в пределах диапазонов, показанных в таблице 4.2. С этими входными параметрами был проведен расчет по теоретической модели с распараллеленным с использованием подхода OpenMP численным кодом.

Таблица 4.2. Диапазоны входных значений ИНС.

Параметр модели	Область разыгрываемых значений
V_x [m/s]	0...150
Ψ	0...1
$\log_{10}(\rho_I^\delta)$ [m ⁻²]	10...15
A_I	0,05...15
V_I [m/s]	0,05...10
F_{mp}	0...0,36
k_a	0,05...10
k_D	0,05...0,6

В качестве ИНС-эмулятора используется полносвязная искусственная нейронная сеть с прямой связью. Она состоит из 8 нейронов входного слоя, 2 нейронов выходного слоя и 7 скрытых слоев по 33 нейрону в каждом слое (см. рисунок 4.24). ИНС-эмулятор для латуни удалось обучить до уровня среднеквадратичной ошибки 0,21% и максимальной ошибки 9,1% на проверочных данных; корреляционные кривые показаны на рис. 4.25. (а-б).

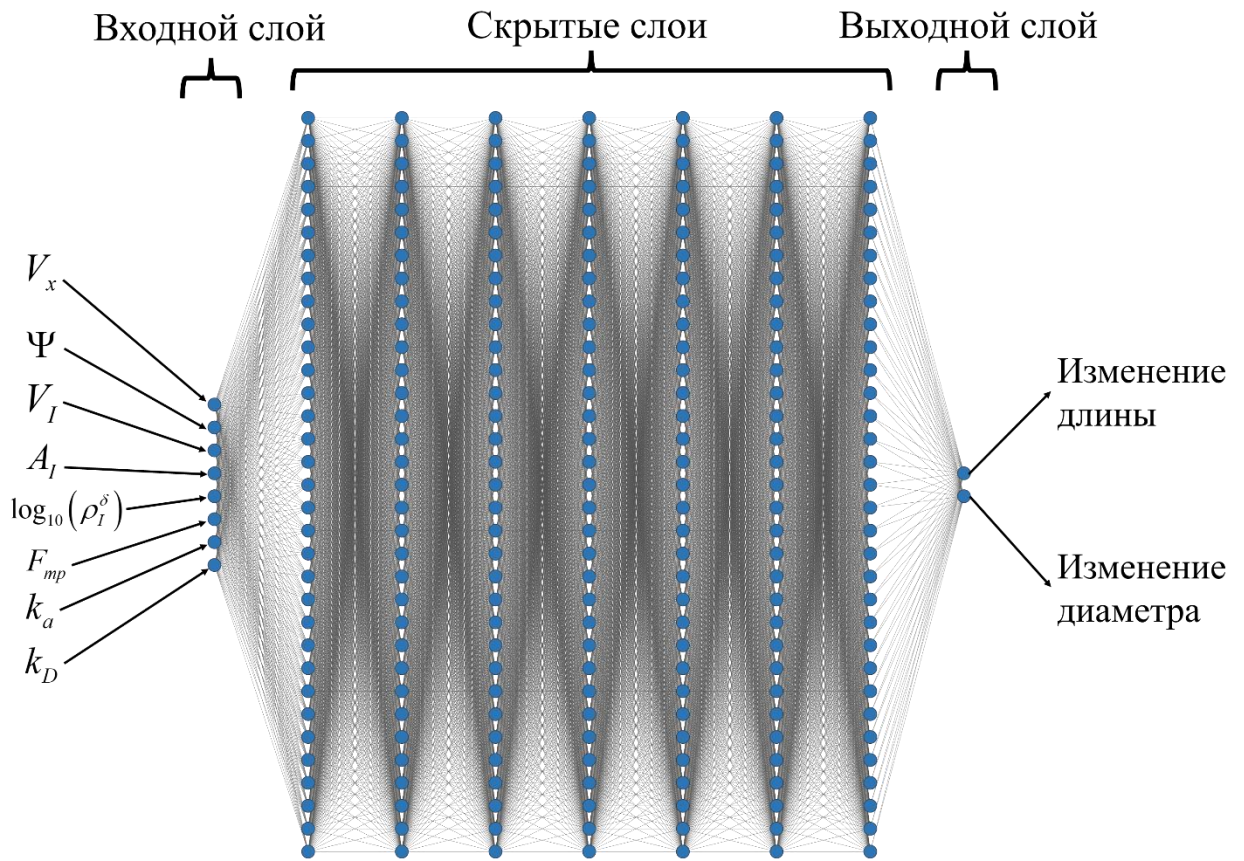


Рис. 4.24. Структура ИНС-эмулятора трехмерной теоретической модели: 7х33 скрытых слоев, 8 входов и 2 выхода.

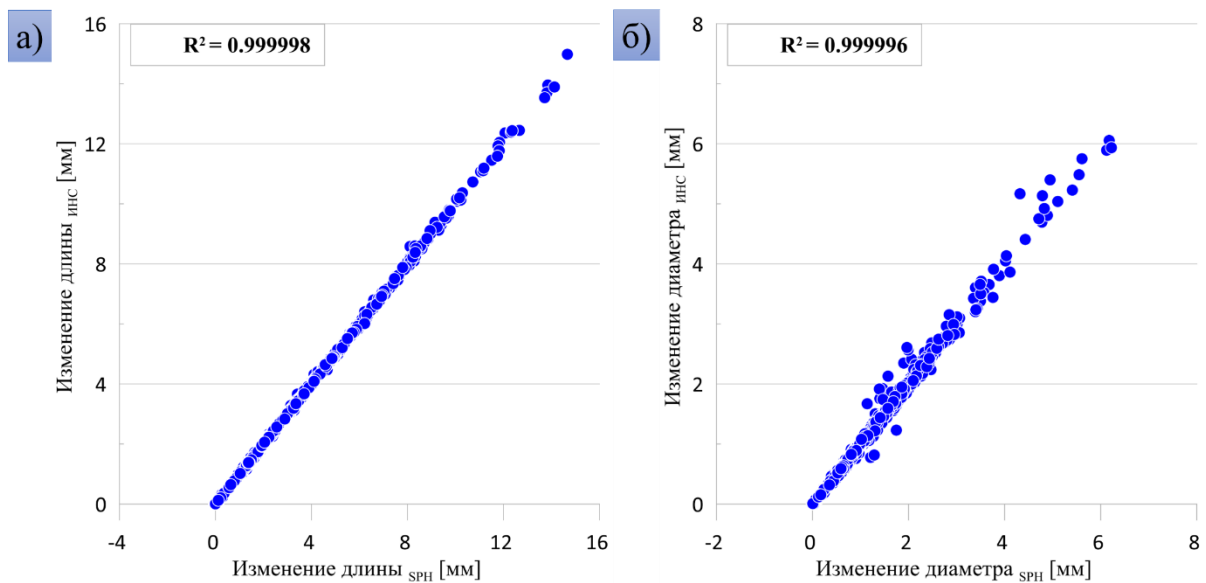


Рис. 4.25. Корреляционные кривые, проверка точности нейронной сети на проверочных данных: (а) изменение длины и (б) изменение диаметра.

4.3.2. Оптимизация параметров модели статистическим методом Байеса для латуни

После обучения ИНС используется как быстрый эмулятор трехмерной теоретической модели для определения оптимальных параметров модели с помощью байесовского алгоритма. Из эксперимента у нас есть список из 18 строк: 8 экспериментов для классического 8-мм латунного цилиндра и 3 эксперимента для уменьшенного 4-мм цилиндра; при этом эксперименты для профилированного цилиндра были специально продублированы по 3 раза для каждой из скоростей соударения, это позволило уровнять их «веса» с классическими 8-мм цилиндрами при байесовской оптимизации модели. Эксперименты содержат скорость удара V_x , форму образца Ψ и два значения для сравнения (изменение длины и диаметра ударника). Шесть выбранных параметров модели $\{\rho_I^\delta(t=0), A_I, V_I, F_{mp}, k_a, k_D\}$ разыгрываются случайным образом в пределах диапазонов, совпадающих с теми, которые использовались для обучения ИНС (см. таблицу 4.2.). Для каждого конкретного набора параметров модели $\{\rho_I^\delta(t=0), A_I, V_I, F_{mp}, k_a, k_D\}$ два других входа ИНС $\{V_x, \Psi\}$ проходят через все 18 экспериментов из списка.

На рис. 4.26(а-д) карты распределения вероятностей параметров модели построены с использованием 100 тысяч розыгрышей и всего набора экспериментов. На представленных картах коэффициент упрочнения A_I сравнивается с остальными параметрами модели. Исходя из полученных карт распределения вероятностей можно сделать вывод, что наибольшее влияние на изменение диаметра и длины образца оказывают коэффициент упрочнения A_I и начальная плотность иммобилизованных дислокаций $\rho_I^\delta(t=0)$, рисунок 4.26. (б). Другие подобранные параметры более «мягко» влияют на длину и диаметр образца, при этом эти параметры влияют на

финальный профиль деформированного образца, позволяют достичь большего соответствия с экспериментальными образцами.

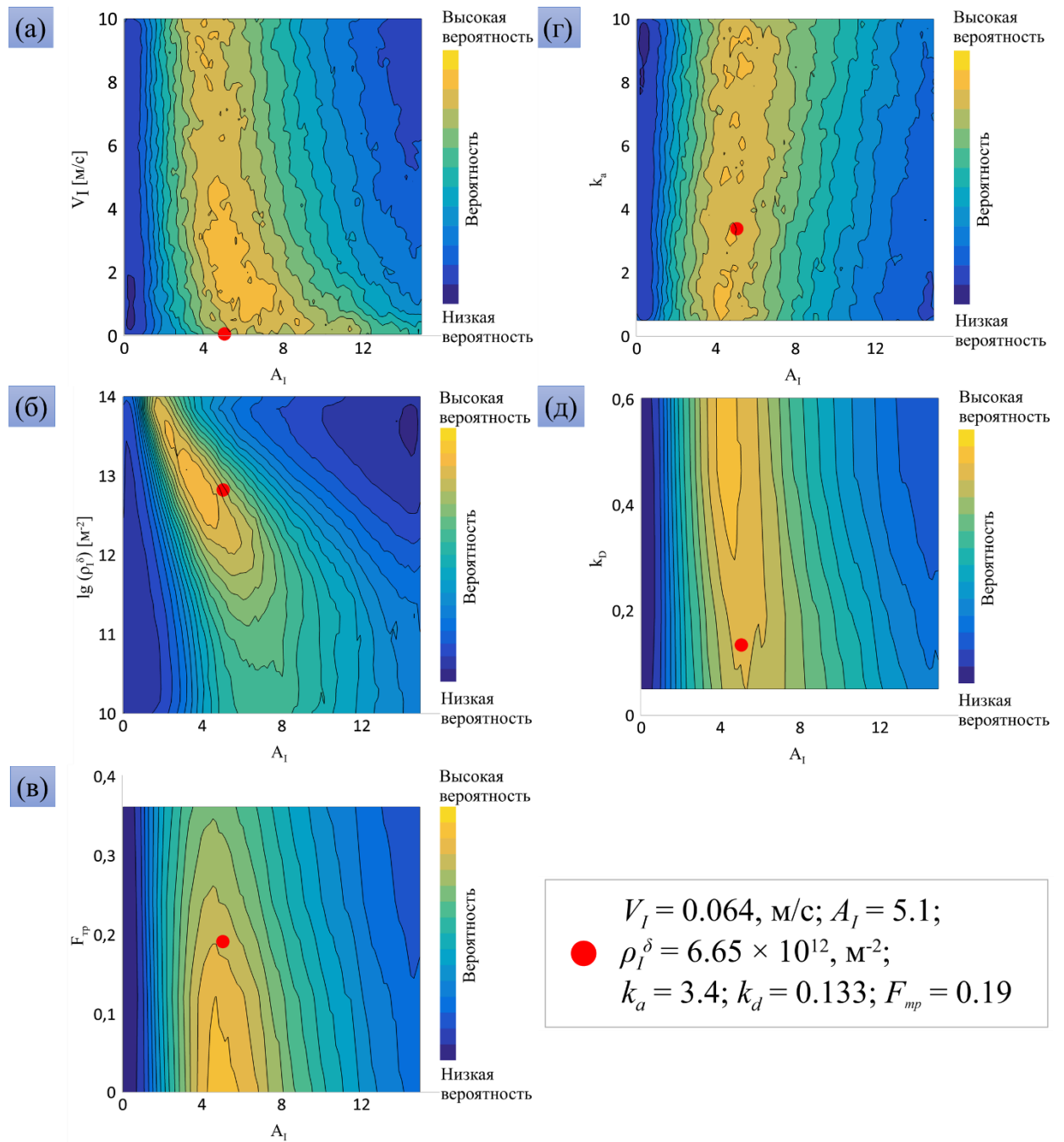


Рис. 4.26. Карты распределения вероятностей параметров модели, построенные в плоскостях: (а) $A_I - V_I$, (б) $A_I - \rho_I^\delta$, (в) $A_I - F_{mp}$, (г) $A_I - k_a$ и (д) $A_I - k_D$. Красный кружок показывает локальный максимум, с параметрами которого будет производиться расчет SPH.

На рисунке 4.27 показано сравнение расчета по теоретической модели (с подобранными методом Байеса параметрами) с экспериментальными данными, видно разумное согласие с экспериментом.

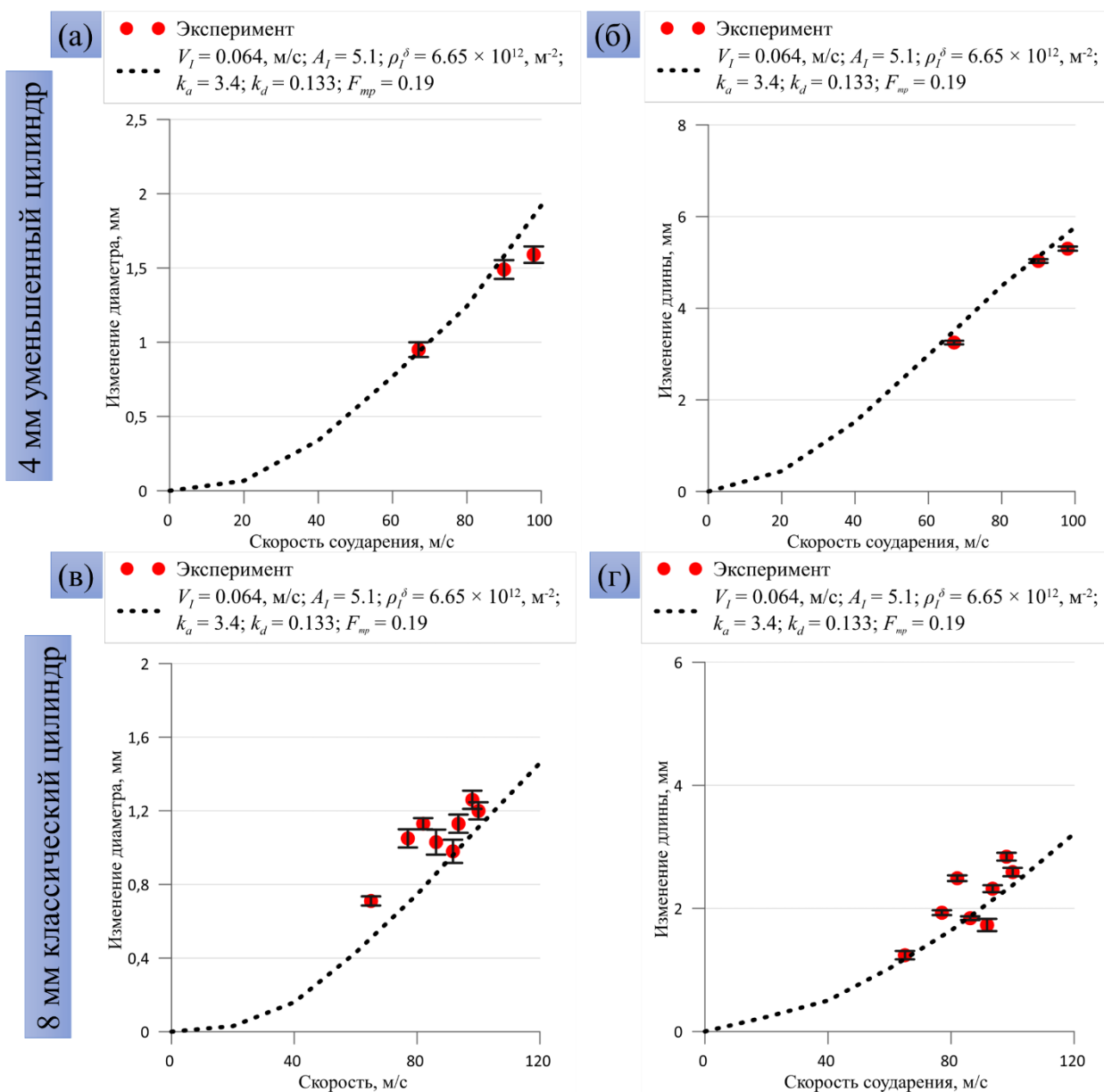


Рис. 4.27. Сравнение результатов трехмерной теоретической модели с экспериментальными данными. Зависимости от скорости удара: (а,в) изменения диаметра и (б,г) изменение длины 4-мм уменьшенного цилиндра (а,б) и классического 8-мм цилиндра (в,г).

Рассмотрим совпадение параметризованной теоретической модели с экспериментами, рис. 4.27. Теоретическая модель дает статистически

обоснованное описание как трендов, так и значений изменения длины и диаметра поверхности соударения для всех форм образцов. Расширение списка оптимизируемых параметров модели позволило более точно описать эксперимент, чем в случае с медными образцами. Уравнивание весов экспериментов для 4-мм уменьшенного цилиндра с классическими 8-мм цилиндрами позволило единообразно учитывать геометрические параметры двух форм ударников. Если корректировкой весов обучающих данных для разных форм цилиндров пренебречь, то за счет большего количества экспериментов с 8-мм цилиндром, подобранные параметры модели будут более точно описывать эту форму ударника, при этом давая неприемлемые результаты для уменьшенных 4-мм цилиндров.

4.3.3. Результаты теоретической модели для профилированных латунных цилиндров

На рис. 4.28. показана эквивалентная пластическая деформация, распределение температуры и пространственное распределение эквивалентного напряжения фон Мизеса, полученные в результате численного моделирования для профилированных латунных цилиндров с 4-мм головной частью. Пластическая деформация в основном сосредоточена в области уменьшенного цилиндра. Распределение температуры аналогично распределению пластической деформации. Максимальное значение температуры составляет 611 К; средняя температура в деформированной части образца составляет около 450 К. Напряжение по Мизесу в образцах достигает значения около 1,1 ГПа. В момент времени 50 мкс напряжение максимально в области перехода уменьшенного 4-мм цилиндра в 8-мм цилиндрическую часть, напряжения в этой области превышают значения на ударной поверхности образца.

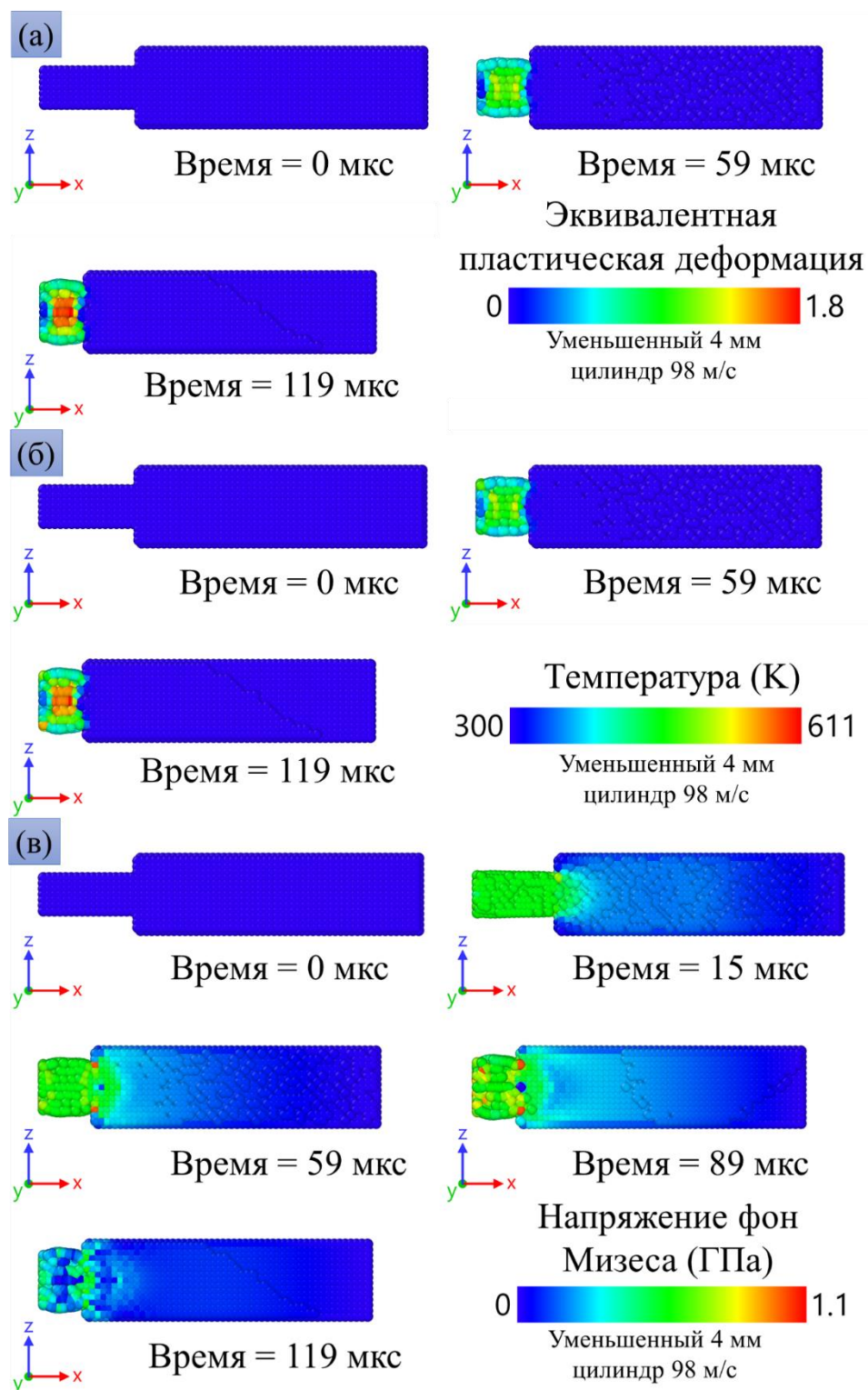


Рисунок 4.28. Результаты теоретической модели для уменьшенного цилиндра диаметром 4 мм при скорости удара 98 м/с: пространственное распределение (а) эквивалентной пластической деформации, (б) температуры и (в) эквивалентного напряжения фон Мизеса в центральном сечении в последовательные моменты времени.

4.3.4. Результаты теоретической модели для классических латунных цилиндров

На рис. 4.29(а) показана эквивалентная пластическая деформация. Пластическая деформация сосредоточена вблизи поверхности удара; по мере ее распространения к средней части образца пластическая деформация затухает до нуля. В центре контактной поверхности значения пластической деформации максимальны. На рис. 4.29(б) показано распределение температуры в численном эксперименте. Наиболее высокие температуры получаются в центральной части ударной поверхности образца. Максимальное повышение температуры составляет около 125 К. На рис. 4.29(в) показано пространственное распределение эквивалентного напряжения фон Мизеса. После начала деформации наблюдается равномерное распределение напряжений почти по всей длине образца, поле напряжений здесь примерно равно 0,45–0,55 ГПа. Наибольшие напряжения наблюдаются на ударной поверхности. После остановки образца и дальнейшего отскока наблюдается резкое падение напряжения.

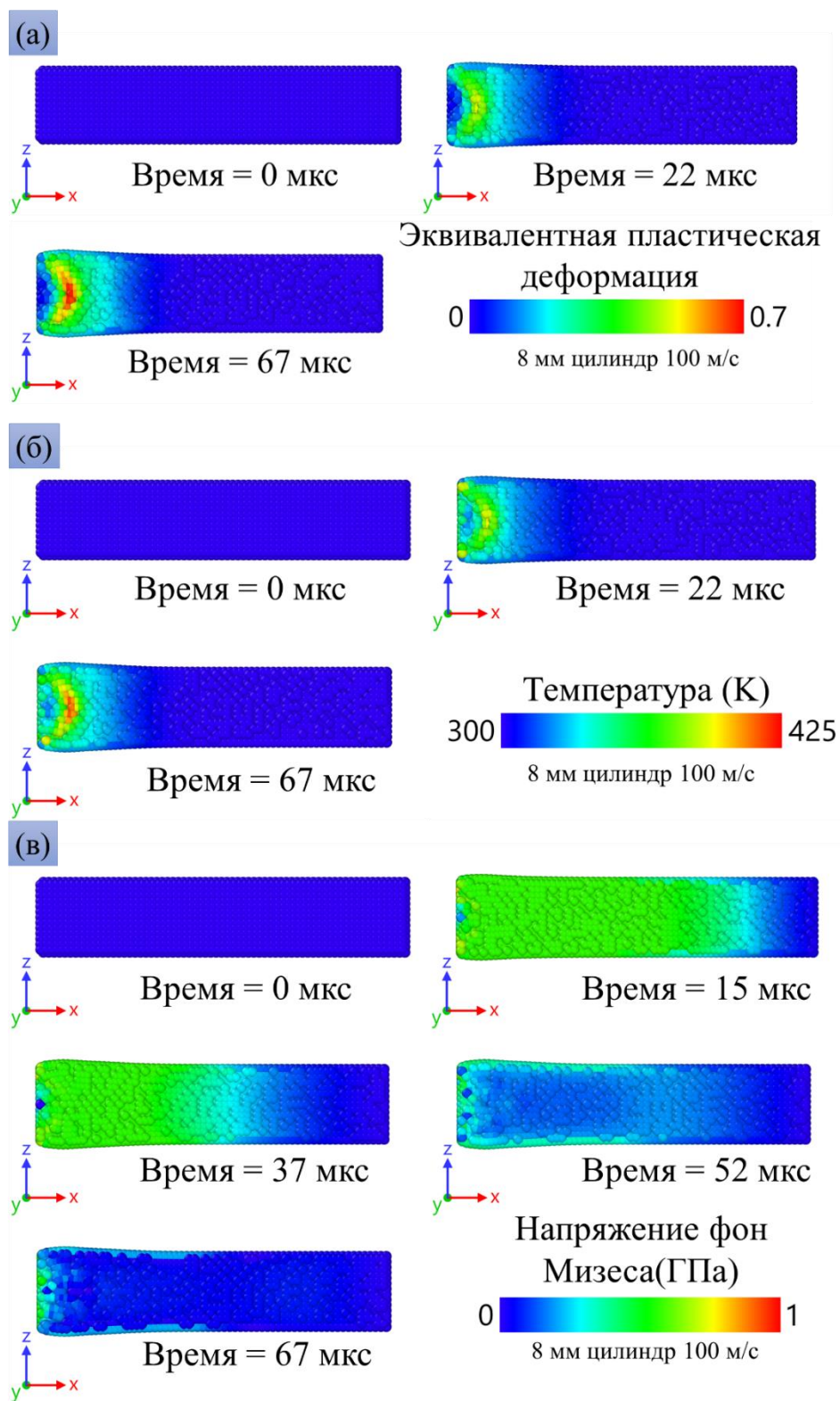


Рисунок 4.29. Результаты теоретической модели для классического цилиндра диаметром 8 мм при скорости удара 100 м/с: пространственное распределение (а) эквивалентной пластической деформации, (б) температуры и (в) эквивалентного напряжения фон Мизеса в центральном сечении в последовательные моменты времени.

Выводы по четвертой главе

Четвертая глава посвящена разработке и применению метода параметризации трехмерной теоретической модели на основе машинного обучения. Был обучен ИНС-эмулятор теоретической модели, после чего применялся статистический метод Байеса для выявления оптимальных параметров модели. ИНС-эмулятор позволяет существенно ускорить скорость подбора коэффициентов модели. Параметризация была выполнена для случая пластически деформированных твердых медных и латунных ударников. Для случая мягких отожженных медных ударников результаты моделирования соответствуют эксперименту при использовании тех же параметров, но пониженной начальной плотности неподвижных дислокаций, что физически обосновано.

Основные результаты исследования, проведенного в этой главе:

- 1) Эмулятор работы SPH для медных цилиндров удалось обучить до уровня среднеквадратичной ошибки 0,4% и максимальной ошибки 4,62% на проверочных данных. Карты распределения вероятности параметризуемых величин показали, что использование только всех форм предложенных цилиндров позволит наиболее точно подобрать коэффициенты для модели. Параметризованная модель показала хорошее совпадение с экспериментом. Была проведена оценка измельчения зерен за счет выделяющейся энергии при аннигиляции дислокаций, а также вычислена объемная доля порообразных структур. В частности, в случае уменьшенного цилиндра численное моделирование предсказывает сильное измельчение зерна с уменьшением диаметра зерна примерно до 0,7 мкм в деформированной головной части. Это хорошо согласуется с результатами микроструктурного анализа, где размер зерна вблизи

ударной поверхности составляет менее 2 мкм, что является порогом используемой оптической микроскопии.

- 2) Параметризованная модель была проверена на задаче о плоском соударении пластин и собственном эксперименте на отожженных медных образцах. Задача о плоском соударении пластин обеспечивает большие скорости деформации, чем в тестах Тейлора, но меньшие истинные деформации. В задаче о плоском соударении пластин и экспериментах с термически обработанными ударниками была снижена плотность иммобилизованных дислокаций до $\rho_1^\delta(t=0) = 10^{11} \text{ м}^{-2}$, что соответствует мягкой горячекатаной меди. В обоих случаях модель дислокационной пластичности показала адекватное соответствие с экспериментальными данными.
- 3) Параметризация латунного сплава для модели дислокационной пластичности выполнялась впервые. Для параметризации латунных образцов были выбраны только пластически деформированные образцы, то есть только классические 8 мм и уменьшенные 4 мм цилиндры. Удалось обучить эмулятор до уровня среднеквадратичной ошибки 0,21% и максимальной ошибки 9,1% на проверочных данных. Параметризованная модель для случая латунных образцов показала хорошее соответствие с экспериментом.

В результаты проведенных исследований доказаны следующие положения из списка результатов и положений, выносимых на защиту:

Положение № 2. «Вывод о возможности использования искусственной нейронной сети (ИНС) в качестве быстрого эмулятора трехмерного численного кода SPH для оценки влияния параметров модели на изменение геометрических размеров образца при высокоскоростном соударении. Один расчет SPH в однопоточном режиме требует порядка суток, а ИНС эмулятор срабатывает за 10^{-4} с.»

Положение № 4. «Теоретический подход на основе машинного обучения для оптимизации параметров (обучения) модели дислокационной пластичности под конкретный материал по наборам экспериментальных данных тестов Тейлора для классических и профилированных образцов. Оптимизация параметров проводится статистическим методом Байеса с использованием ИНС эмулятора трехмерной численной модели SPH. Использование обучающих экспериментальные данные для разных форм образцов и скоростей соударения дает более четкую локализацию области оптимальных параметров модели. Развитый подход к оптимизации параметров модели позволяет правильно оценивать состояние образцов до деформации, в частности, для холоднокатанной меди начальная плотность дислокаций определена как $0.8 \cdot 10^{14} \text{ м}^{-2}$, что соответствует оценкам из микроструктурных наблюдений и литературным данным для деформированной меди.»

Заключение

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

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

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

Предложена методика автоматической параметризации модели дислокационной пластичности с использованием собственных экспериментальных результатов и методов машинного обучения. Для параметризации применяется ИНС-эмулятор модели, а также статистический метод Байеса, сравнивающий экспериментальные результаты с прогнозом ИНС-эмулятора. Модель была параметризована для холоднокатанных медных ударников, при этом доказала свою применимость в сравнении с экспериментами на отоженных медных образцах, для которых

параметризация не выполнялась. Параметры модели для латунного сплава были подобраны впервые.

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

В целом предлагается эффективный метод оптимизации параметров модели дислокационной пластичности. Параметры модели задают конкретный материал и его исходное состояние; поэтому оптимизация необходима для каждого материала отдельно. Область возможных практических приложений разработанной трехмерной теоретической модели включает решение различных инженерных задач, таких как оптимизация процессов высокоскоростной обработки металлов, резанья, упрочнении материала с помощью метода лазерной ударной проковки [155] и т.д. Все эти практические приложения требуют адекватной теоретической модели материала для описания его реакции на динамическое нагружение.

Список публикаций автора по теме диссертации:

Публикации в научных изданиях, рекомендованных ВАК Минобрнауки РФ:

1. Rodionov E.S., Lupanov V.G., Gracheva N.A., Mayer P.N., Mayer A.E. Taylor impact tests with copper cylinders: experiments, microstructural analysis and 3D SPH modeling with dislocation plasticity and MD-informed artificial neural network as equation of state // *Metals*. – 2022. – V. 12. – P. 264. <https://doi.org/10.3390/met12020264>.
2. Rodionov E.S., Pogorelko V.V., Lupanov V.G., Mayer P.N., Mayer A.E. Modified Taylor impact tests with profiled copper cylinders: experiment and optimization of dislocation plasticity model // *Materials*. – 2023. – V. 16. – P. 5602. <https://doi.org/10.3390/ma16165602>.
3. Rodionov E.S., Mayer A.E., Estimation of dynamic yield stress by Taylor test with reduced cylindrical head part of samples // *Chelyabinsk Physical and Mathematical Journal*. – 2023. – V. 8(3). – P. 399–409. <https://doi.org/10.47475/2500-0101-2023-8-3-399-409>.

Тезисы докладов научных конференций:

1. Е. С. Родионов, В. Г. Лупанов, Н. А. Грачёва, П. Н. Майер, А. Е. Майер, «Соударение профилированных медных цилиндров с жесткой стенкой: эксперимент и микроструктурный анализ» // *Забабахинские научные чтения: сборник материалов XV Международной конференции 27 сентября – 1 октября 2021*. – Снежинск: Издательство РФЯЦ – ВНИИТФ, 2021. – 138 с. ил.
2. Родионов Е.С., Лупанов В.Г., Грачева Н.А., Майер П.Н., Майер А.Е., «Соударение профилированных медных цилиндров с жесткой стенкой: эксперимент, микроструктурный анализ и моделирование» // *Перспективные материалы и технологии: материалы международного симпозиума, Минск, 23 - 27 августа 2021 г.* / под. ред. В.В. Рубаника - Минск: Белорусский государственный институт стандартизации и сертификации», 2021. – 375 с.

3. Е.С. Родионов, В.Г. Лупанов, Н.А. Грачева, П.Н. Майер, А.Е. Майер., «Соударение профилированных медных цилиндров с жесткой стенкой: эксперимент и микроструктурный анализ» // Труды 64-й Всероссийской научной конференции МФТИ. 29 ноября – 03 декабря 2021. Фундаментальная и прикладная физика / сост. : К.С. Слободчук, А.В. Гец ; Министерство науки и высшего образования Российской Федерации, Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет). — Москва–Долгопрудный-Жуковский : МФТИ, 2021. – 432 с.
4. Родионов Е.С., Лупанов В.Г., Грачёва Н.А., Майер П.Н., Майер А.Е., «Соударение профилированных медных цилиндров с жесткой стенкой: эксперимент, микроструктурный анализ и 3d sph моделирование» // Физическая мезомеханика материалов. Физические принципы формирования многоуровневой структуры и механизмы нелинейного поведения : Тез. докл. Междунар. конф., 5-8 сентября 2022 г., Томск, Россия / Ин-т физики прочности и материаловедения СО РАН. – Новосибирск : ИПЦ НГУ, 2022. – 193 с. <https://doi.org/10.25205/978-5-4437-1353-3-118>.

Список литературы

1. Taylor G.I. The use of flat-ended projectiles for determining dynamic yield stress. I. Theoretical considerations // Proc. R. Soc. London, Ser. – A. – 194 (1038) – 1948. – P. 289–299. <https://doi.org/10.1098/rspa.1948.0081>.
2. Whiffin A.C. The use of flat-ended projectiles for determining dynamic yield stress. II. Tests on various metallic materials // Proc. R. Soc. London, Ser. – A. – 194 (1038) – 1948. – P. 300–322. <https://doi.org/10.1098/rspa.1948.0082>.
3. Carrington W.E., Gayler M.L.V. The use of flat-ended projectiles for determining dynamic yield stress III. Changes in microstructure caused by deformation under impact at high-striking velocities // Proc. R. Soc. London, Ser. – A. – 194 (1038) – 1948. – P. 323–331. <https://doi.org/10.1098/rspa.1948.0083>.
4. Moćko W., Janiszewski J., Radziejewska J., Grażka M. Analysis of deformation history and damage initiation for 6082-T6 aluminium alloy loaded at classic and symmetric Taylor impact test conditions // Int. J. Impact. Eng. – 75 – 2015. – P. 203–213. <http://dx.doi.org/10.1016/j.ijimpeng.2014.08.015>.
5. Rodionov E.S., Lupanov V.G., Gracheva N.A., Mayer P.N., Mayer A.E. Taylor Impact Tests with Copper Cylinders: Experiments, Microstructural Analysis and 3D SPH Modeling with Dislocation Plasticity and MD-Informed Artificial Neural Network as Equation of State // Metals. – 2022. – V.12. – P. 264. <https://doi.org/10.3390/met12020264>.
6. Zelepugin S.A., Pakhnutova N.V., Shkoda O.A., Boyangin E.N. Experimental study of the microhardness and microstructure of a copper specimen using the Taylor impact test // Metals. – 2022. – V.12. – P. 2186. <https://doi.org/10.3390/met12122186>.
7. Xu J., Liu Q., Xu Y.F., Guo S.H., Li C., Zhang N.B., Cai Y., Liu X.Y., Lu L., Luo S.N. Taylor impact of high-entropy alloy Al_{0.1}CoCrFeNi: Dynamic severe plastic deformation and bulk gradient structure // J. Alloys Compd. – 2023. – P. 936. – 168261. <https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2022.168261>.

8. Lim H., Battaile C.C., Brown J.L., Weinberger C.R. Physically-based strength model of tantalum incorporating effects of temperature, strain rate and pressure // *Model. Simul. Mater. Sci. Eng.* – 2016. – V.24. – 055018. <https://doi.org/10.1088/0965-0393/24/5/055018>.
9. Piao M.J., Huh H., Lee I., Park L. Characterization of hardening behaviors of 4130 Steel, OFHC Copper, Ti6Al4V alloy considering ultra-high strain rates and high temperatures // *Int. J. Mech. Sci.* – 2017. – P.131–132. – 1117–1129. <http://dx.doi.org/10.1016/j.ijmecsci.2017.08.013>.
10. Rivera D., Bernstein J., Schmidt K., Muyskens A., Nelms M., Barton N., Kupresanin A., Florando J. Bayesian calibration of strength model parameters from Taylor impact data // *Comput. Mater. Sci.* – 2022. – V.210. – 110999. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2021.110999>.
11. Bragov A., Lomunov A., Konstantinov A., Kruszka L., Proud B., Identification and verification of some plasticity models for structural materials by using pressure bar technique // *Conference series* – 2010.
12. Tohme T., Vanslette K., Youcef-Toumi K., A generalized Bayesian approach to model calibration // *Reliability Engineering & System Safety.* – V. 204. – 2020. – 107141. – ISSN 0951-8320, <https://doi.org/10.1016/j.ress.2020.107141>.
13. Walters D.J., Biswas A., Lawrence E.C., Francom D.C., Luscher D.J., Fredenburg D.A., Moran K.R., Sweeney C.M., Sand-berg R.L., Ahrens J.P., et al. Bayesian calibration of strength parameters using hydrocode simulations of symmetric impact shock experiments of Al-5083 // *J. Appl. Phys.* – 2018. – V.124. – 205105. <https://doi.org/10.1063/1.5051442>.
14. Nguyen T., Fensin S.J., Luscher D.J. Dynamic crystal plasticity modeling of single crystal tantalum and validation using Taylor cylinder impact tests // *Int. J. Plast.* – 2021. – V. 139. – 102940. <https://doi.org/10.1016/j.ijplas.2021.102940>.

15. Sjue S., Ahrens J., Biswas A., Francom D., Lawrence E., Luscher D., Walters D. Fast strength model characterization using Bayesian statistics // AIP Conf. Proc. – 2020. – 2272. – 70043. <https://doi.org/10.1063/12.0000882>.
16. Preston D.L., Tonks D.L., Wallace D.C. Model of plastic deformation for extreme loading conditions // J. Appl. Phys. – 2003. – V.93 – (1). – P. 211–220. <https://doi.org/10.1063/1.1524706>.
17. Antoun T., Seaman L., Curran D.R., Kanel G.I., Razorenov S.V., Utkin A.V. Spall Fracture // Springer: New York. – NY. – USA. – 2003.
18. Kanel G.I., Fortov V.E., Razorenov S.V. Shock waves in condensed-state physics // Phys. Usp. – 2007. – V. 50. – P. 771–791. <https://doi.org/10.1070/PU2007v050n08ABEH006327>.
19. Barker L.M., Hollenbach R.E. Laser interferometer for measuring high velocities of any reflecting surface // J. Appl. Phys. – 1972. – V. 43(11). – 4669–75. <https://doi.org/10.1063/1.1660986>.
20. Kanel G.I., Razorenov S.V., Baumung K., Singer J. Dynamic yield and tensile strength of aluminum single crystals at temperatures up to the melting point // J. Appl. Phys. – 2001. – V. 90. – P. 136–143. <https://doi.org/10.1063/1.1374478>.
21. Winey J.M., LaLone B.M., Trivedi P.B., Gupta Y.M. Elastic wave amplitudes in shock-compressed thin polycrystal-line aluminum samples // J. Appl. Phys. – 2009. – V. 106. – 073508. <https://doi.org/10.1063/1.3236654>.
22. Gurrutxaga-Lerma B., Shehadeh M.A., Balint D.S., Dini D., Chen L., Eakins D.E. The effect of temperature on the elastic precursor decay in shock loaded FCC aluminium and BCC iron // Int. J. Plast. – 2017. – V. 96. – P.135–155. <http://doi.org/10.1016/j.ijplas.2017.05.001>.
23. Saveleva N.V., Bayandin Y.V., Savinykh A.S., Garkushin G.V., Razorenov S.V., Naimark O.B. The formation of elastoplastic fronts and spall fracture in amg6 alloy under shock-wave loading // Tech. Phys. Lett. – 2018. – V. 44. – P. 823–826. <http://doi.org/10.1134/S1063785018090286>.

24. Gnyusov S.F., Rotshtein V.P., Mayer A.E., Rostov V.V., Gunin A.V., Khishchenko K.V., Levashov P.R. Simulation and experimental investigation of the spall fracture of 304L stainless steel irradiated by a nanosecond relativistic high-current electron beam // *Int. J. Fract.* – 2016. – V. 199. – P. 59–70. <https://doi.org/10.1007/s10704-016-0088-8>.
25. Gnyusov S.F., Rotshtein V.P., Mayer A.E., Astafurova E.G., Rostov V.V., Gunin A.V., Maier G.G. Comparative study of shock-wave hardening and substructure evolution of 304L and Hadfield steels irradiated with a nanosecond relativistic high-current electron beam // *J. Alloys. Compd.* – 2017. – V. 714. – P. 232–244. <http://doi.org/10.1016/j.jallcom.2017.04.219>.
26. Baumung K., Bluhm H.J., Goel B., Hoppé P., Karow H.U., Rusch D., Fortov V.E., Kanel G.I., Razorenov S.V., Utkin A.V., et al. Shock-wave physics experiments with high-power proton beams // *Laser Part. Beams* – 1996. – V. 14. – P. 181–209. <https://doi.org/10.1017/S0263034600009939>.
27. Baumung K., Bluhm H., Kanel G.I., Müller G., Razorenov S.V., Singer J., Utkin, A.V. Tensile strength of five metals and alloys in the nanosecond load duration range at normal and elevated temperatures // *Int. J. Impact. Eng.* – 2001. – V. 25. – P. 631–639. [https://doi.org/10.1016/S0734-743X\(01\)00004-5](https://doi.org/10.1016/S0734-743X(01)00004-5).
28. Moshe E., Eliezer S., Dekel E., Ludmirsky A., Henis Z., Werdiger M., Goldberg I.B. An increase of the spall strength in aluminum, copper, and Metglas at strain rates larger than 10^7 s⁻¹ // *J. Appl. Phys.* – 1998. – V. 83. – P. 4004. <https://doi.org/10.1063/1.367222>.
29. Krasnyuk I.K., Pashinin, P.P., Semenov A.Y., Khishchenko K.V., Fortov V.E. Study of extreme states of matter at high energy densities and high strain rates with powerful lasers // *Laser Phys.* – 2016. – P. 26. – 094001. <https://doi.org/10.1088/1054-660X/26/9/094001>.
30. Ashitkov S.I., Komarov P.S., Struleva E.V., Agranat M.B., Kanel G.I. Mechanical and optical properties of vanadium under shock picosecond loads // *JETP Lett.* – 2015. – V. 101. – P. 276–281. <https://doi.org/10.1134/S0021364015040049>.

31. Kanel G.I., Zaretsky E.B., Razorenov S.V., Ashitkov S.I., Fortov V.E. Unusual plasticity and strength of metals at ultra-short load durations // *Phys. Usp.* – 2017. – V. 60 – P. 490–508. <https://doi.org/10.3367/UFNe.2016.12.038004>.
32. Zuanetti B., McGrane S.D., Bolme C.A., Prakash V. Measurement of elastic precursor decay in pre-heated aluminum films under ultra-fast laser generated shocks // *J. Appl. Phys.* – 2018. – V. 123. – 195104. <https://doi.org/10.1063/1.5027390>.
33. Pakhnutova N.V., Boyangin E.N., Shkoda O.A., Zelepugin S.A. Microhardness and dynamic yield strength of copper samples upon impact on a rigid wall // *Adv. Eng. Res.* – 2022. – V. 22. – P. 224. <https://doi.org/10.23947/2687-1653-2022-22-3-224-231>.
34. Eakins D.E., Thadhani N.N. Instrumented Taylor anvil-on-rod impact tests for validating applicability of standard strength models to transient deformation states // *J. Appl. Phys.* – 2006. – V. 100. – 073503. <https://doi.org/10.1063/1.2354326>.
35. Rakvåg K.G., Børvik T., Westermann I., Hopperstad O.S., An experimental study on the deformation and fracture modes of steel projectiles during impact // *Materials & Design.* – 2013. – V. 51. – P. 242-256. – ISSN 0261-3069, <https://doi.org/10.1016/j.matdes.2013.04.036>.
36. Giedrius J., Rimantas K., Sergėjus B., Jerzy R., Comparative numerical study of rate-dependent continuum-based plasticity models for high-velocity impacts of copper particles against a substrate // *International Journal of Impact Engineering.* – 2023. – V. 172. – 104394. – ISSN 0734-743X, <https://doi.org/10.1016/j.ijimpeng.2022.104394>.
37. Johnson G.R., Cook W.H. Fracture characteristics of three metals subjected to various strains, strain rates, temperatures and pressures // *Eng. Fract. Mech.* – 1985. – V. 21. – P. 31–48. [https://doi.org/10.1016/0013-7944\(85\)90052-9](https://doi.org/10.1016/0013-7944(85)90052-9).
38. Cowper G., Symonds P., Strain-hardening and strain-rate effects in the impact loading of cantilever beams // Technical report. Brown University. Division of Applied Mathematics. – 1957. <https://doi.org/10.21236/AD0144762>.

39. Chong G., Takeshi I., Yoshikazu T., Takayuki K. Numerical and experimental studies on specimens with integrated pulse-shaper used for the instrumented Taylor impact test to measure stress-strain curves at high rates of strain // *Int. J. Impact Eng.* – 2023. – V. 179. – 104644. – ISSN 0734-743X, <https://doi.org/10.1016/j.ijimpeng.2023.104644>.
40. Meyers M.A. *Dynamic behavior of materials*. John Wiley & Sons. – 1994. <https://doi.org/10.1002/9780470172278>.
41. Yu T.X., Xinming Qiu. *Introduction to impact dynamics*. John Wiley & Sons. – 2018.
42. Zhou L., Wen H. A new dynamic plasticity and failure model for metals // *Metals (Basel)*. – 2019. – V. 9. – 905. <https://doi.org/10.3390/met9080905>.
43. Gama B.A., Lopatnikov S.L., J.W.Jr. Gillespie. Hopkinson bar experimental technique: a critical review // *Appl. Mech. Rev.* – 2004. – 01. <https://doi.org/10.1115/1.1704626>.
44. Kolsky H. An investigation of the mechanical properties of materials at very high rates of loading // *Proc. Phys. Soc. London. – Sect. B.* – 1949. – V.62. – 676.
45. Clifton R.J., Gilat A., Li CH. Dynamic Plastic Response of Metals Under Pressure-Shear Impact. In: Mescall, J., Weiss, V. (eds) *Material Behavior Under High Stress and Ultrahigh Loading Rates* // *Sagamore Army Materials Research Conference Proceedings*. – 1983. – V. 29. – Springer. Boston. MA. https://doi.org/10.1007/978-1-4613-3787-4_1
46. Kennedy D.R. *History of the shaped charge effect: the first 100 years*. Virginia: D. R. Kennedy and Associates, Inc. – 1990. – Defense Technical Information Center
47. Murr L.E., Niou C.-S., Sanchez J.C., Zernow L. A comparison of shaped charge liner cone and recovered jet fragment microstructures to elucidate dynamic recrystallization phenomena // *Scr. Metall Mater.* – 1995. – V.32. – 31–6. [https://doi.org/10.1016/S0956-716X\(99\)80007-7](https://doi.org/10.1016/S0956-716X(99)80007-7).
48. Zernow L. PhD dissertation. Johns Hopkins University. – MD. – USA. – 1953.

49. Guo W., Li S.K., Wang F.C., Wang M. Dynamic recrystallization of tungsten in a shaped charge liner // *Scr. Mater.* – 2009. – V. 60. – 329–32. <https://doi.org/10.1016/j.scriptamat.2008.10.028>.
50. Melekhin N.V., Bragov A.M., Berendeev N.N., Chuvil'deev V.N., Balandin V.V., Microcumulation at impact loading as a method of comparative evaluation of dynamic plasticity of metallic materials: Case of copper // *Int. J. Impact Eng.* – 2023. – V. 174. – 104481. <https://doi.org/10.1016/j.ijimpeng.2022.104481>.
51. Lavrent'ev M.A. Cumulative charge and principles of its operation // *Uspekhi Mat. Nauk.* – 1957. – V. 12. – P. 41–56. [Russian Mathematical Surveys]in Russ.
52. Zhao S., Petrov Y.V., Volkov G.A. The modified relaxation plasticity model and the non-monotonic stress–strain diagram // *Int. J. Mech. Sci.* – 2023. – V. 240. – 107919. <https://doi.org/10.1016/j.ijmecsci.2022.107919>.
53. Johnson G.K., Cook W.H. A Constitutive Model and Data Metals Subjected to Large Strains, High Strain Rates and High Temperatures. In *Proceedings of the 7th International Symposium on Ballistics. The Hague. The Netherlands.* – 1983. – V. 19–21. – P. 541–547.
54. Vasu K.R.S., Vinith Y.G., Uday S.G., Suneesh G., Krishna M.B. A review on Johnson Cook material model // *Mater. Today Proc.* – 2022. – V. 62(6). – P. 3450–3456. <https://doi.org/10.1016/j.matpr.2022.04.279>.
55. Zerilli F.J., Armstrong R.W. Dislocation mechanics based constitutive relations for material dynamics calculations // *J. Appl. Phys.* – 1987. – V. 61. – P. 1816–1825. <https://doi.org/10.1063/1.338024>.
56. Armstrong R.W., Arnold W., Zerilli F.J. Dislocation mechanics of shock-induced plasticity // *Metall. Mater. Trans. A.* – 2007. – V. 38. – P. 2605–2610. <https://doi.org/10.1007/s11661-007-9142-5>.
57. Colvin J.D., Minich R.W., Kalantar D.H. A model for plasticity kinetics and its role in simulating the dynamic behavior of Fe at high strain rates // *Int. J. Plast.* – 2009. – V. 25. – P. 603–611. <https://doi.org/10.1016/j.ijplas.2008.12.008>.

58. Austin R.A., McDowell D.L. A dislocation-based constitutive model for viscoplastic deformation of FCC metals at very high strain rates // *Int. J. Plast.* – 2011. – V. 27. – P. 1–24. <https://doi.org/10.1016/j.ijplas.2010.03.002>.
59. Krasnikov V.S., Mayer A.E., Yalovets A.P. Dislocation based high-rate plasticity model and its application to plate-impact and ultra-short electron irradiation simulations // *Int. J. Plast.* – 2011. – V. 27. – P. 1294–1308. <https://doi.org/10.1016/j.ijplas.2011.02.008>.
60. Mayer A.E., Khishchenko K.V., Levashov P.R., Mayer P.N. Modeling of plasticity and fracture of metals at shock loading // *J. Appl. Phys.* – 2013. – V. 113. – 93508. <http://doi.org/10.1063/1.4805713>.
61. Barton N.R., Bernier J.V., Becker R., Arsenlis A., Cavallo R., Marian J., Rhee M., Park H.-S., Remington B.A., Olson R.T. A multiscale strength model for extreme loading conditions // *J. Appl. Phys.* – 2011. – V. 109. – 073501. <https://doi.org/10.1063/1.3553718>.
62. Luscher D.J., Mayeur J.R., Mourad H.M., Hunter A., Kenamond M.A. Coupling continuum dislocation transport with crystal plasticity for application to shock loading conditions // *Int. J. Plast.* – 2016. – V. 76. – P. 111–129. <http://doi.org/10.1016/j.ijplas.2015.07.007>.
63. Yao S., Pei X., Yu J., Wu Q. Assessment of the time-dependent behavior of dislocation multiplication under shock loading // *Int. J. Plast.* – 2022. – V. 158. – 103434. <https://doi.org/10.1016/j.ijplas.2022.103434>.
64. Johnson J.N., Barker L.M. Dislocation dynamics and steady plastic wave profiles in 6061-T6 Aluminum // *J. Appl. Phys.* – 1969. – V. 40. – P. 4321–4334.
65. Mayer A.E. Dynamic shear and tensile strength of iron: Continual and atomistic simulation // *Mech. Solids.* – 2014. – V. 49. – P. 649-656. <https://doi.org/10.3103/S0025654414060065>.
66. Borodin E.N., Mayer A.E. Structural model of mechanical twinning and its application for modeling of the severe plastic deformation of copper rods in

- Taylor impact tests // *Int. J. Plast.* – 2015. – V. 74. – P. 141–157.
<http://doi.org/10.1016/j.ijplas.2015.06.006>.
67. Yao S.L., Pei X.Y., Yu J.D., Bai J.S., Wu Q. A dislocation-based explanation of quasi-elastic release in shock-loaded aluminum // *J. Appl. Phys.* – 2017. – V. 121. – 035101. <https://doi.org/10.1063/1.4974055>.
68. Yao S., Pei X., Yu J., Wu Q. Scale dependence of thermal hardening of fcc metals under shock loading // *J. Appl. Phys.* – 2020. – V. 128. – 0026226. <https://doi.org/10.1063/5.0026226>.
69. Popova T.V., Mayer A.E., Khishchenko K.V. Evolution of shock compression pulses in polymethylmethacrylate and aluminum // *J. Appl. Phys.* – 2018. – V. 123. – 235902. <https://doi.org/10.1063/1.5029418>.
70. Selyutina N., Borodin E.N., Petrov Y., Mayer, A.E. The definition of characteristic times of plastic relaxation by dislocation slip and grain boundary sliding in copper and nickel // *Int. J. Plast.* – 2016. – V. 82. – P. 97–111. <http://doi.org/10.1016/j.ijplas.2016.02.004>.
71. Lax P.D.; Wendroff B. Systems of conservation laws // *Commun. Pure. Appl. Math.* – 1960. – V. 13. (2). – P. 217–237. doi:10.1002/cpa.3160130205. Archived from the original on September 25, 2017.
72. Barkanov E. Introduction to the Finite Element Method. Riga Technical University. – 2001. – 70 p.
73. Carroll W.F. A Primer for Finite Elements in Elastic Structures. John Wiley & Sons, Inc. – 1998. 512 p. – ISBN: 978-0-471-28345-4.
74. Frey P.J. Mesh Generation. Application to Finite Elements. London: ISTE Publishing Company. – 2008. – P. 814. – ISBN 978-1- 84821-029-5.
75. Hutton D.V. Fundamentals of Finite Element Analysis. McGraw Hill. – 2003. 640 p. – ISBN 0-07-239536-2.
76. Le K.H. Finite Element Mesh Generation Methods: A Review and Classification // *Computer-Aided Design.* – 1988. – V. 20(1).– P. 27-38.

77. Moaveni S. Finite Element Analysis: Theory and Application with ANSYS // Harlow: Pearson Education Limited. – 2015. – 936 p. – ISBN 978-0- 13-384080-3.
78. Allen M.P., Tildesley A.K. Computer Simulation of Liquids. Oxford: Clarendon Press. – 1987.
79. Gingold R.A., Monaghan J.J. Smoothed particle hydrodynamics: Theory and application to non-spherical stars // Mon. Not. R. Astron. Soc. – 1977. – V. 181. – 375-389. <http://doi.org/10.1093/mnras/181.3.375>.
80. Monaghan J.J. Smoothed particle hydrodynamics // Rep. Prog. Phys. – 2005. – V. 68. – P. 1703–1759. <http://doi.org/10.1088/0034-4885/68/8/R01>.
81. Monaghan J.J. An introduction to SPH // Comput. Phys. Commun. – 1998. – V. 48. – P. 89–96. [https://doi.org/10.1016/0010-4655\(88\)90026-4](https://doi.org/10.1016/0010-4655(88)90026-4).
82. Pan W., Li D., Tartakovsky A.M., Ahzi S., Khraisheh M., Khaleel M. A new smoothed particle hydrodynamics non-Newtonian model for friction stir welding: Process modeling and simulation of microstructure evolution in a magnesium alloy // Int. J. Plast. – 2013. – V. 48. – P. 189–204. <http://dx.doi.org/10.1016/j.ijplas.2013.02.013>.
83. Islam M.R.I., Chakraborty S., Shaw A. On consistency and energy conservation in smoothed particle hydrodynamics // Int. J. Numer. Methods Eng. – 2018. – V. 116. – P. 601–632. <http://dx.doi.org/10.1002/nme.5937>.
84. Li X., Roth C.C., Mohr D. Machine-learning based temperature and rate-dependent plasticity model: Application to analysis of fracture experiments on DP steel // Int. J. Plast. – 2019. – V. 118. – P. 320–344. <https://doi.org/10.1016/j.ijplas.2019.02.012>.
85. Libersky L.D., Petschek A.G. Smooth particle hydrodynamics with strength of materials, advances in the free lagrange method // Lecture Notes in Physics. – 1990. – V. 395. – P. 248–257. https://doi.org/10.1007/3-540-54960-9_58.
86. Libersky L.D., Petschek A.G., Carney A.G., Hipp T.C., Allahdadi J.R., High F.A. Strain Lagrangian hydrodynamics: a three-dimensional SPH code for

- dynamic material response // J. Comput. Phys. – 1993. – V. 109. (1). – P. 67–75. <https://doi.org/10.1006/jcph.1993.1199>.
87. Ma J., Chen J., Chen W., Huang L. A coupled thermal-elastic-plastic-damage model for concrete subjected to dynamic loading // Int. J. Plast. – 2022. – V. 153. – 103279. <https://doi.org/10.1016/j.ijplas.2022.103279>.
88. Ma J., Chen J., Guan J., Lin Y., Chen W., Huang L. Implementation of Johnson-Holmquist-Beissel model in four-dimensional lattice spring model and its application in projectile penetration // Int. J. Impact Eng. – 2022. – V. 170. – 104340. <https://doi.org/10.1016/j.ijimpeng.2022.104340>.
89. Александров П.С. Комбинаторная топология. М.–Л.: ГИТТЛ. – 1947. – 660 с.
90. Александров П.С. Лекции по аналитической геометрии. М.: Наука. – 1968. –912 С.
91. Александров П.С., Пасынков Б.А. Введение в теорию размерности. Введение в теорию топологических пространств и общую теорию размерности. М.: Наука. – 1973. –576 с.
92. Болтянский В.Г. Оптимальное управление дискретными системами. М.: Наука. – 1973. –448 с.
93. Кострикин А.И., Манин Ю.И. Линейная алгебра и геометрия. 2-е изд. – М.: Наука. – 1986. –304 с.
94. Понтрягин Л. С. Основы комбинаторной топологии. М. –Л.: ГИТТЛ. – 1947. – С.142. –23–31 с.
95. Nelder J.A., Mead R. A Simplex Method for Function Minimization // Computer Journal. – 1965. – V. 7(4). – P. 308–313. <https://doi.org/10.1093/comjnl/7.4.308>
96. Spendley W., Hext G. R., Himesworth F.R. Sequential application of simplex designs in optimisation and Evolutionary Operation // Technometrics. – 1962. – V. 4. – P. 441.

97. Engels J.K., Vajragupta N., Hartmaier A. Parameterization of a non-local crystal plasticity model for tempered lath martensite using nanoindentation and inverse method // *Front. Mater.* – 2019. – V. 6. – P. 247. <https://doi.org/10.3389/fmats.2019.00247>.
98. Koza John R., Bennett, Forrest H., Andre David, Keane, Martin A. Automated design of both the topology and sizing of analog electrical circuits using genetic programming // *Artificial Intelligence in Design '96. Artificial Intelligence in Design '96.* Springer, Dordrecht. – 1996. – P. 151–170. https://doi.org/10.1007/978-94-009-0279-4_9.
99. Samuel A. Some Studies in Machine Learning Using the Game of Checkers // *IBM Journal of Research and Development.* – 1959. – V. 3 (3). – P. 210–229. CiteSeerX 10.1.1.368.2254. doi:10.1147/rd.33.0210. S2CID 2126705.
100. Kohavi R., Provost F. Glossary of terms // *Machine Learning.* – 1998. – V. 30. – N. 2–3. – P. 271–274.
101. Sarle, Warren S. Neural Networks and statistical models // *SUGI 19: proceedings of the Nineteenth Annual SAS Users Group International Conference.* SAS Institute. – 1994. – P. 1538–50. ISBN 9781555446116. OCLC 35546178.
102. Горбань А.Н. Обобщённая аппроксимационная теорема и вычислительные возможности нейронных сетей Архивная копия от 27 января 2012 на Wayback Machine // *Сибирский журнал вычислительной математики.* – 1998. – Т. 1. – № 1. – С. 12–24.
103. Jordan B., Gorji M.B., Mohr D. Neural network model describing the temperature- and rate-dependent stress-strain response of polypropylene // *Int. J. Plast.* – 2020. – V. 135. – 102811. <https://doi.org/10.1016/j.ijplas.2020.102811>.
104. Gorji M.B., Mozaffar M., Heidenreich J.N., Cao J., Mohr D. On the potential of recurrent neural networks for modeling path dependent plasticity //

- J. Mech. Phys. Solids. – 2020. – V. 43. – 103972.
<https://doi.org/10.1016/j.jmps.2020.103972>.
105. Bonatti C., Mohr D. Neural network model predicting forming limits for Bilinear strain paths // Int. J. Plast. – 2021. – V. 137. – 102886.
<https://doi.org/10.1016/j.ijplas.2020.102886>.
106. Liu Z., Wang Y., Hua X. Prediction and optimization of oscillating wave surge converter using machine learning techniques // Energy Convers. Manag. – 2020. – V. 210. – 112677. <https://doi.org/10.1016/j.enconman.2020.112677>.
107. Kim K., Kim W.S., Seo J., Jeong Y., Lee, J. Quantitative measure of concrete fragment using ANN to consider uncertainties under impact loading // Sci. Rep. – 2022. – V. 12. – 11248. <https://doi.org/10.1038/s41598-022-15253-z>.
108. Klippel H., Sanchez E.G., Isabel M., Röthlin M., Afrasiabi M., Michal K., Wegener K. Cutting force prediction of Ti6Al4V using a machine learning model of SPH // J. Mach. Eng. – 2022. – V. 22. – P. 111–123.
<https://doi.org/10.36897/jme/147201>.
109. Chegini H.G., Zarepour G. Numerical study of rectangular tank with sloshing fluid and simulation of the model using a machine learning method // Geofluids. – 2022. – 4121956. <https://doi.org/10.1155/2022/4121956>.
110. Yang A., Romanyk D., Hogan J.D. High-velocity impact study of an advanced ceramic using finite element model coupling with a machine learning approach // Ceram. Int. – 2023. – V. 49. – 10481-10498.
<https://doi.org/10.1016/j.ceramint.2022.11.234>.
111. Yin M., Zhang E., Yu Y., Karniadakis G.E. Interfacing finite elements with deep neural operators for fast multiscale modeling of mechanics problems // Comput. Methods Appl. Mech. Eng. – 2022. – V. 402. – 115027.
<https://doi.org/10.1016/j.cma.2022.115027>.
112. Latypov F.T., Fomin E.V., Krasnikov V.S., Mayer A.E. Dynamic compaction of aluminum with nanopores of varied shape: MD simulations and

- machine-learning-based approximation of deformation behavior // *Int. J. Plast.* – 2022. – 156. – 103363. <https://doi.org/10.1016/j.ijplas.2022.103363>.
113. Mayer A.E., Krasnikov V.S., Pogorelko V.V. Dislocation nucleation in Al single crystal at shear parallel to (111) plane: Molecular dynamics simulations and nucleation theory with artificial neural networks // *Int. J. Plast.* – 2021. – V. 139. – 102953. <https://doi.org/10.1016/j.ijplas.2021.102953>.
114. Fortov V.E., Khishchenko K.V., Levashov P.R., Lomonosov I.V. Wide-range multi-phase equations of state for metals // *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. A.* – 1998. – V. 415. – P. 604–608. [https://doi.org/10.1016/S0168-9002\(98\)00405-7](https://doi.org/10.1016/S0168-9002(98)00405-7).
115. Khishchenko K.V., Mayer A.E. High- and low-entropy layers in solids behind shock and ramp compression waves // *Int. J. Mech. Sci.* – 2021. – V. 189. – 105971. <https://doi.org/10.1016/j.ijmecsci.2020.105971>.
116. Kuropatenko V.F. New models of continuum mechanics // *J. Eng. Phys. Thermophys.* – 2011. – V. 84. – P. 77–99. <https://doi.org/10.1007/s10891-011-0457-0>.
117. Rittel D., Zhang L.H., Osovski S. The dependence of the Taylor–Quinney coefficient on the dynamic loading mode // *J. Mech. Phys. Solids.* – 2017. – V. 107. – P. 96–114. <https://doi.org/10.1016/j.jmps.2017.06.016>.
118. Landau L.D., Lifshitz E.M. *Theory of Elasticity; Course of Theoretical Physics.* Elsevier: Amsterdam, The Netherlands. – 1986. – V. 7.
119. Hirth J.P., Lothe J. *Theory of Dislocations.* Wiley & Sons: New York, NY, USA. – 1982.
120. Peach M., Koehler J.S. The forces exerted on dislocations and the stress fields produced by them // *Phys. Rev.* – 1950. – V. 80. – P. 436–439. <https://doi.org/10.1103/PhysRev.80.436>.
121. Krasnikov V.S., Mayer A.E. Influence of local stresses on motion of edge dislocation in aluminum // *Int. J. Plast.* – 2018. – V. 101. – P. 170–187. <https://doi.org/10.1016/j.ijplas.2017.11.002>.

122. Mayer A.E., Krasnikov V.S. Molecular Dynamics Investigation of Dislocation Slip in Pure Metals and Alloys. ICTAEM 2019. In Proceedings of the Second International Conference on Theoretical, Applied and Experimental Mechanics, Corfu, Greece, 23–26 June 2019; Springer: Manhattan, NY, USA. – 2019. – V. 8. – P. 59–64. https://doi.org/10.1007/978-3-030-21894-2_12.
123. Franciosi P. The concepts of latent hardening and strain hardening in metallic single crystals // *Acta Metall.* – 1985. – V. 33. – P. 1601–1612. [https://doi.org/10.1016/0001-6160\(85\)90154-3](https://doi.org/10.1016/0001-6160(85)90154-3).
124. Devincere B., Kubin L., Hoc T. Physical analyses of crystal plasticity by DD simulations // *Scr. Mater.* – 2006. – V. 54. – P. 741–746. <https://doi.org/10.1016/j.scriptamat.2005.10.066>.
125. Bulatov V.V., Reed B.W., Kumar M. Grain boundary energy function for fcc metals // *Acta Mater.* – 2014. – V. 65. – P. 161–175. <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2013.10.057>.
126. Han J., Vitek V., Srolovitz D.J. Grain-boundary metastability and its statistical properties // *Acta Mater.* – 2016. – V. 104. – P. 259–273. <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2015.11.035>.
127. Zhou G., Huang Q., Chen Y., Yu X., Zhou H. Annihilation mechanism of low-angle grain boundary in nanocrystalline metals // *Metals.* – 2022. – V. 12. – P. 451. <https://doi.org/10.3390/met12030451>.
128. Krasnikov V., Mayer A., Bezborodova P., Gazizov M. Effect of copper segregation at low-angle grain boundaries on the mechanisms of plastic relaxation in nanocrystalline aluminum: An atomistic study // *Materials.* – 2023. – V. 16. – 3091. <https://doi.org/10.3390/ma16083091>.
129. Hoover W.G. Canonical dynamics: Equilibrium phase-space distributions // *Phys. Rev. A.* – 1985. – V. 31. – P. 1695–1697. <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.31.1695>.
130. Plimpton S. Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics // *J. Comput. Phys.* – 1995. – V. 117. – P. 1–19. <https://doi.org/10.1006/jcph.1995.1039>.

131. Apostol F., Mishin Y. Interatomic potential for the Al-Cu system // Phys. Rev. B. – 2011. – V. 83. – 054116. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.83.054116>.
132. Thompson A.P., Plimpton S.J., Mattson W. General formulation of pressure and stress tensor for arbitrary many-body inter-action potentials under periodic boundary conditions // J. Chem. Phys. – 2009. – V. 131. – 154107. <https://doi.org/10.1063/1.3245303>.
133. Goodfellow I., Bengio Y., Courville A. Deep Learning. MIT Press: Cambridge, MA, USA. – 2016. Available online: www.deeplearningbook.org (accessed on 22 May 2023).
134. Nielsen M. Neural Networks and Deep Learning. – 2019. – Available online: neuralnetworksanddeeplearning.com (accessed on 22 May 2023).
135. Grachyova N.A., Lekanov M.V., Mayer A.E., Fomin E.V. Application of neural networks for modeling shock-wave processes in aluminum // Mech. Solids. – 2021. – V. 56. – P. 326-342. <https://doi.org/10.3103/S0025654421030031>.
136. Marrone S., Di Mascio A., Le Touzé D. Coupling of Smoothed Particle Hydrodynamics with Finite Volume method for free-surface flows // J. Comput. Phys. – 2016. – V. 310. – P. 161–180. <http://dx.doi.org/10.1016/j.jcp.2015.11.059>.
137. Stukowski A. Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO—the Open Visualization Tool // Modell. Simul. Mater. Sci. Eng. – 2010. – V. 18. – 015012. <http://doi.org/10.1088/0965-0393/18/1/015012>. <http://www.ovito.org>.
138. Skripnyak N., Skripnyak V.A. Fracture of thin metal sheets with distribution of grain sizes in the layers // 2016. – P. 355-365. 10.7712/100016.1818.11099.
139. Bai Y., Dodd B. Shear Localization: Occurrence Theories and Applications. Pergamon Press: Oxford, UK. – 1992.
140. Wright T. The Physics and Mathematics of Adiabatic Shear Bands. Cambridge University Press: Cambridge, UK. – 2002.

141. Walley S.M. Shear localization: A historical overview // Metall. Mater. Trans. A. – 2007. – V. 38. – P. 2629-2654. <https://doi.org/10.1007/s11661-007-9271-x>.
142. Shockey D.A., Murr L.E., Staudhammer K.P., Meyers M.A. Metallurgical Applications of Shock-Wave and High-Strain-Rate Phenomena // Marcel-Dekker: New York, NY, USA. – 1986. – P. 633–656.
143. Shahan A.R., Taheri A.K. Adiabatic shear bands in titanium and titanium alloys: A critical review // Mater. Res. Bull. – 1993. – V. 14. – P. 243–250. [https://doi.org/10.1016/0261-3069\(93\)90078-A](https://doi.org/10.1016/0261-3069(93)90078-A).
144. Tresca H. On further application of the flow of solids // Proc. Inst. Mech. Eng. – 1878. – V. 30. – P. 301–345. https://doi.org/10.1243/PIME_PROC_1878_029_017_02.
145. Massey H.F. The Flow of Metals during Forging. In Transactions—Manchester Association of Engineers; The University of Michigan: Ann Arbor, MI, USA. – 1921. – P. 21–66.
146. Zener C., Hollomon J.H. Effect of strain rate upon plastic flow of steel // J. Appl. Phys. – 1944. – V. 15. – P. 22–32. <https://doi.org/10.1063/1.1707363>.
147. Johnson W., Baraya G.L., Slater R.A.C. On heat lines or lines of thermal discontinuity // Int. J. Mech. Sci. – 1964. – V. 6. – P. 409–414. [https://doi.org/10.1016/S0020-7403\(64\)80001-1](https://doi.org/10.1016/S0020-7403(64)80001-1).
148. Xu Y., Zhang J., Bai Y., Meyers M.A. Shear localization in dynamic deformation: Microstructural evolution // Metall. Mater. Trans. A. – 2008. – V. 39. – P. 811-843. <https://doi.org/10.1007/s11661-007-9431-z>.
149. Fomin E.V., Mayer A.E. Slip of low-angle tilt grain boundary (110) in FCC metals at perpendicular shear // Int. J. Plast. – 2020. – V. 134. – 102843. <https://doi.org/10.1016/j.ijplas.2020.102843>.
150. Staker M.R., Holt D.L. The dislocation cell size and dislocation density in copper deformed at temperatures between 25 and 700 °C // Acta Metall. – 1972. – V. 20. – P. 569-579. [https://doi.org/10.1016/0001-6160\(72\)90012-0](https://doi.org/10.1016/0001-6160(72)90012-0).

151. Rodionov E.S., Pogorelko V.V., Lupanov V.G., Mayer P.N., Mayer A.E. Modified Taylor Impact Tests with Profiled Copper Cylinders: Experiment and Optimization of Dislocation Plasticity Model // *Materials*. – 2023. – V. 16. – 5602. <https://doi.org/10.3390/ma16165602>
152. Kanel G.I., Savinykh A.S., Garkushin G.V., Razorenov S.V. Effects of temperature and strain on the resistance to high-rate deformation of copper in shock waves // *J. Appl. Phys.* – 2020. – V. 128. – 115901. <https://doi.org/10.1063/5.0021212>.
153. Follansbee P., Regazzoni G., Kocks U. The transition to drag-controlled deformation in copper at high strain rates // *Inst. Phys. Conf. Ser.* – 1984. – V. 70. – P. 71–80.
154. Lea L.J., Jardine A.P. Characterisation of high-rate plasticity in the uniaxial deformation of high purity copper at elevated temperatures // *Int. J. Plast.* – 2018. – V. 102. – P. 41–52. <https://doi.org/10.1016/j.ijplas.2017.11.006>.
155. Mironov S., Ozerov M., Kalinenko A., Stepanov N., Salishchev G., Zhrebtsov S., Plekhov O., Sikhamov R., Ventzke V., Kashaev N., et al. On the relationship between microstructure and residual stress in laser-shock-peened Ti-6Al-4V // *J. Alloys Compd.* – 2022. – V. 900. – 163383. <https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2021.163383>.