

Латыпов Фаниль Таярович

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

Специальность 1.3.3. Теоретическая физика

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени  
кандидата физико-математических наук

Челябинск, 2022

Работа выполнена на кафедре общей и теоретической физики Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Челябинский государственный университет»

Научный руководитель: **Майер Александр Евгеньевич**, доктор физико-математических наук, доцент, заведующий кафедрой общей и теоретической физики Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Челябинский государственный университет» (г. Челябинск).

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

**Селютина Нина Сергеевна**, кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Санкт-Петербургский государственный университет» (г. Санкт-Петербург).

Ведущая организация: Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт физики прочности и материаловедения Сибирского отделения Российской академии наук (г. Томск).

Защита состоится 2 марта 2023 г. на заседании диссертационного совета 24.2.431.0 при ФГБОУ ВО «Челябинский государственный университет» по адресу: 454001, г. Челябинск, ул. Братьев Кашириных, 129, конференц зал.

С диссертацией можно ознакомиться в научной библиотеке Челябинского государственного университета. Электронная версия автореферата доступна по адресу: <http://www.csu.ru>

Автореферат разослан «\_\_\_» \_\_\_\_\_ г.

учёный секретарь  
диссертационного совета 24.2.431.01,  
доктор физико-математических наук, доцент

Загребин М.А.

## ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

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

Искусственные нейронные сети (ИНС), представляются перспективными для описания сложного механического поведения пористого материала. Нейронная сеть – очень гибкий инструмент [7] с большим количеством подгоночных параметров, которые представляют собой веса и смещения искусственных нейронов; но он не включает никакой априорной информации о рассматриваемом физическом процессе, а лишь воспроизводит тенденции в данных. Обучение ИНС по результатам МД может решить проблему гомогенизации, т.к. обучение может производиться на репрезентативном объеме пористой среды, отражающем усредненные характеристики влияния микроструктуры ячеек. Полученное определяющее уравнение на основе ИНС может использоваться в макроскопическом континуальном моделировании. Другой парадигмой машинного обучения является использование физической модели с автоматической подгонкой параметров модели по большому массиву эталонных данных статистическим методом Байеса [8]. В этом случае физическая модель содержит информацию о происходящих процессах и сокращает количество подбираемых параметров по сравнению с ИНС. Актуальным является применение этих двух подходов машинного обучения, ИНС и байесовской идентификации, для описания механического поведения пористого алюминия, а также сравнение эффективности этих подходов.

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

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

**Задачи:**

1. При помощи МД моделирования исследовать влияние пор различных форм и размеров на поведение материала при ударном нагружении, а также сформировать наборы данных (зависимости напряжений, пористости, плотности дислокаций от деформации);
2. Исследовать возможность применения ИНС для аппроксимации полученных результатов МД моделирования;
3. Развить микромеханическую модель механического отклика пористых металлов и методы ее обучения по данным МД моделирования на основе байесовского подхода.
4. Исследовать распространение ударной волны в пористом металле, используя ИНС или микромеханическую модель в качестве определяющего уравнения для элементов среды.
5. Сравнить два подхода машинного обучения, искусственную нейронную сеть и микромеханическую модель с автоматизированным подбором параметров, для описания механических свойств пористых металлов.

**Методы исследования.** В работе применен двухуровневый подход к исследованию механического поведения пористого алюминия и магния при динамической деформации. На микроскопическом уровне с помощью метода молекулярной динамики (МД) исследовано воздействие на пористый металл высокоскоростной деформации сжатия. Рассчитаны кривые напряжение-деформация, пористость-деформация и плотность дислокаций-деформация в диапазоне скоростей деформации от 1/мкс до 10/нс и температур от 300 до 900 К для различных размеров пор и трех видов форм (сферическая, цилиндрическая и кубическая). МД моделирование проводилось с использованием широко используемого пакета программ LAMMPS и хорошо протестированных потенциалов межатомного взаимодействия типа погруженного атома (EAM).

Большие наборы данных, полученные при МД моделировании, использовались для обучения искусственной нейронной сети (подбора параметров для минимизации отклонения от обучающих данных). При помощи ИНС построено определяющее уравнение, описывающее зависимости компонент тензора напряжения от компонент тензора деформации при различных температурах и скоростях деформации, включая стадии упругой и пластической деформации.

Также МД данные были использованы для определения параметров микромеханической модели с автоматизированным подбором параметров на основе байесовского подхода.

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

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

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

Впервые разработанная ИНС и параметризованная микромеханическая модель применяются для моделирования распространения ударной волны в нанопористом алюминии и магнии в сравнении с прямым МД моделированием этого процесса. Впервые на основе этих трех теоретических подходов (ИНС, микромеханическая модель и прямое МД моделирование) исследована структура ударных волн разной интенсивности в нанопористых металлах и показано наличие режимов с «запаздывающим» компактированием нанопор за фронтом ударной волны.

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

**Достоверность результатов.** Точность и достоверность результатов, представленных в работе, обусловлена использованием хорошо апробированного метода молекулярной

динамики (МД), реализующего его пакета программ LAMMPS, зарекомендовавшего себя в большом числе МД исследований, и апробированных потенциалов межатомного взаимодействия для генерации наборов обучающих данных, а также совпадением результатов, полученных по различным методикам (обученная ИНС или микромеханическая модель в сравнении с МД моделированием). Помимо этого, в работе показано соответствие откольной прочности меди, рассчитанной при МД моделировании, экспериментальным данным по отколу при воздействии ударных волн, генерируемых лазерным облучением [9,10].

**Личный вклад автора.** В ходе выполнения научно-квалификационной работы автор принимал активное участие в формулировке целей и задач исследования, проводил численное моделирование, обработку и анализ полученных данных. Автором выполнено МД моделирование деформации пористых металлов и анализ полученных данных; эта часть работы проводилась совместно с Красниковым В.С. Блок работ по обучению искусственной нейронной сети на основе полученных МД результатов выполнялся совместно с Фоминым В.Е. Развитие микромеханической модели сжатия нанопористой среды проводилось совместно с Майером А.Е. Во всех этих задачах вклад автора был существенным либо определяющим, что позволяет представить соответствующие результаты к защите. Также автором реализован численный алгоритм на основе уравнений механики сплошных сред с использованием либо ИНС, либо параметризованной микромеханической модели как определяющего уравнения для моделирования структуры ударной волны в нанопористом металле. Автор участвовал в подготовке результатов исследования к публикации и представлял их на научных конференциях.

#### **Положения и результаты, выносимые на защиту:**

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

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

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

4. Результаты сравнения двух развитых теоретических подходов с результатами прямого молекулярно-динамического моделирования распространения ударной волны в нанопористом алюминии. Оба подхода адекватно описывают профиль ударной волны, как в упругом пределе, так и в случае пластического компактирования пор, включая режим с «запаздывающим» компактированием за фронтом ударной волны. Точность искусственной нейронной сети выше, чем у микромеханической модели на основе дифференциальных по времени уравнений.

#### **Апробация результатов работы.**

Результаты исследований представлены на конференциях: XXIII Всероссийская школа-конференция молодых ученых и студентов «Математическое моделирование в естественных науках» (Пермь, 2014); XIX Зимняя школа по механике сплошных сред. (Пермь, 2015); XXX International Conference on «Interaction of intense energy fluxes with matter» ( Elbrus, 2015); XXXI International Conference on «Equations of State for matter». Russia (Elbrus, 2016); 30th Nordic Seminar on Computational Mechanics (Дания, Копенгаген, 2017); XXXIII International Conference on «Equations of State for Matter» (Russia, Elbrus, 2018); XXIX Всероссийская школа-конференция «Математическое моделирование в естественных науках» (Пермь, 2020); Международная конференция «Математическое моделирование» в рамках 19-й Международной конференции «Авиация и космонавтика» (Москва, 2020); Международный симпозиум «Перспективные материалы и технологии» (Минск, 2021); «XXXVII Фортковская международная конференция по уравнениям состояния вещества» (Россия, п. Эльбрус, 2022); LXIV Международная конференция «Актуальные проблемы прочности» (Екатеринбург, 2022); Международная конференция «Физическая мезомеханика материалов. Физические принципы формирования многоуровневой структуры и механизмы нелинейного поведения» (Томск, 2022)

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

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

## ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

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

**В первой главе** приведен обзор литературы по методам получения, свойствам и теоретическим исследованиям пористых металлов. Рассмотрены основы метода молекулярной динамики и примеры его применения к исследованию пористых металлов. Рассматриваются ИНС и статистический метод Байеса.

**Во второй главе** методом молекулярной динамики (МД) исследуется однородное сжатие и растяжение (в случае меди) представительных объемов пористых металлов.

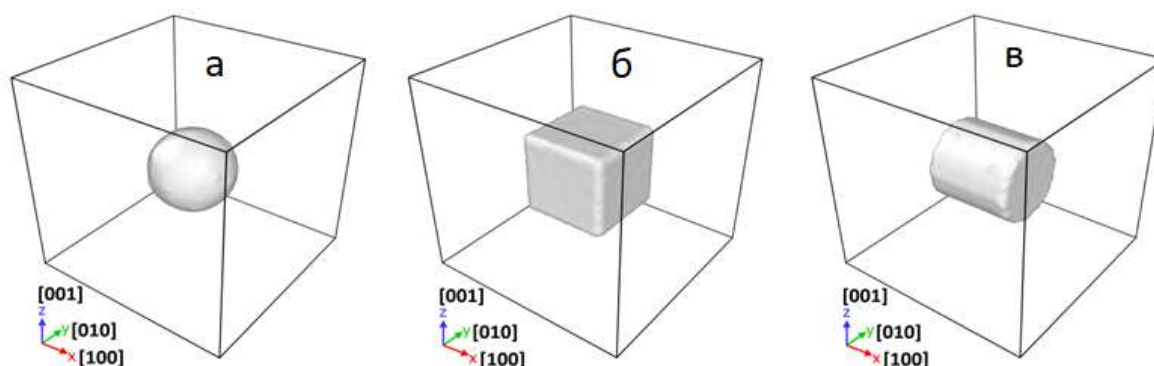


Рис. 1. МД системы для алюминия с порами различной формы размером 8 нм.

Моделируемые системы представляли собой монокристаллы металла кубической формы, в большинстве расчетов размер системы был  $20 \times 20 \times 20 \text{ нм}^3$ ; в случае алюминия были рассмотрены различные формы (сферические, кубические и цилиндрические, см. рис. 1) и размеры пор. Кристаллографические направления  $[100]$ ,  $[010]$  и  $[001]$  совпадали с осями координат  $x$ ,  $y$  и  $z$ . Периодические граничные условия были установлены для всех граней куба. Взаимодействие между атомами было описано с использованием потенциала погруженного атома (EAM) [11] для алюминия и меди и [12] для магния.

Температура во всех испытаниях поддерживалась постоянной со значениями 300, 500, 700 или 900 К с использованием термостата Нозе-Гувера. Пора в системе получалась путем удаления атомов из области соответствующей формы и размера, см. рис. 1. Линейный размер поры варьировался от 4 до 16 нм. Начальная пористость варьировалась от долей процента до 30-50% (в зависимости от формы поры). Применялось как одноосное, так и всестороннее (объемное) сжатие; в большинстве расчетов инженерная скорость деформации равна  $10^9 \text{ с}^{-1}$ .

На рис. 2 представлена эволюция дефектной структуры и характеристик МД системы с малой сферической порой в процессе сжатия. Вначале происходит упругая деформация, пора сохраняет форму и незначительно изменяется в объеме. При определенном уровне



деформации с поверхности пор появляются первые дислокационные полупетли, начинается пластическое течение. В случае всестороннего сжатия касательное напряжение возникает только за счет поры и действует локально в окрестности поры; дислокации остаются локализованными вблизи поры.

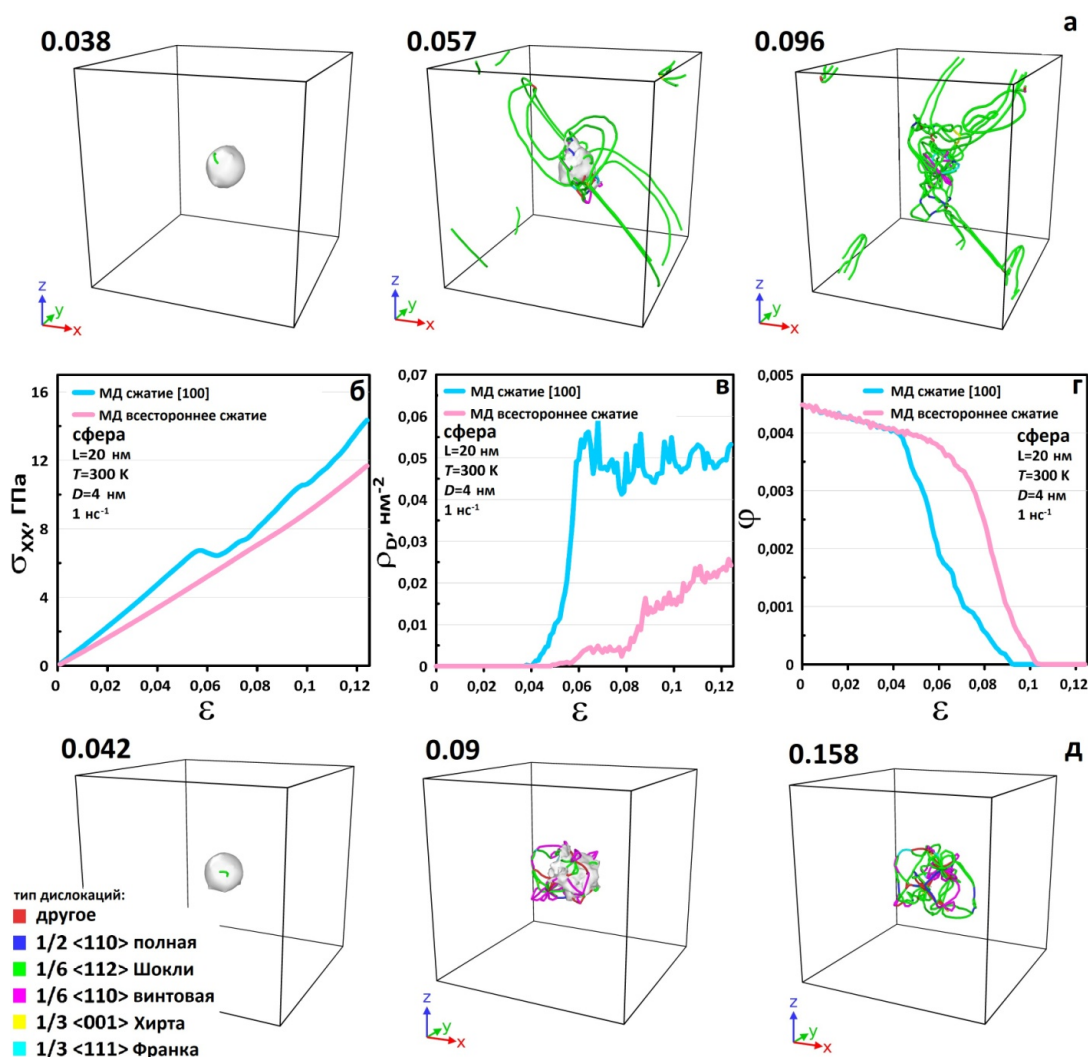


Рис. 2. Пластическое схлопывание маленькой сферической поры диаметром 4 нм в алюминии при одноосном (а) и всестороннем (д) сжатии при 300 К: (а, д) показаны поверхность поры и дислокационные линии; (б, в, г) эволюция продольного напряжения, плотности дислокаций и пористости соответственно.

В случае больших пор зарождение дислокационных петель происходит аналогично случаю малых поры, но при большей деформации. Такая задержка зарождения дислокаций свидетельствует о менее интенсивной концентрации напряжений вокруг крупной поры.

На рис. 3 показаны начальные моменты возникновения зарождающихся дислокационных петель и соответствующие деформации для МД систем с цилиндрическими порами. В случае кубических или цилиндрических пор общие закономерности зарождения и развития пластического течения такие же, как и в случае сферических пор. Основное отличие заключается в величине деформации, приводящей к нуклеации и эмиссии

дислокаций, которая зависит от формы пор. Дислокации образуются на округлых поверхностях цилиндрических пор, а не на плоских поверхностях.

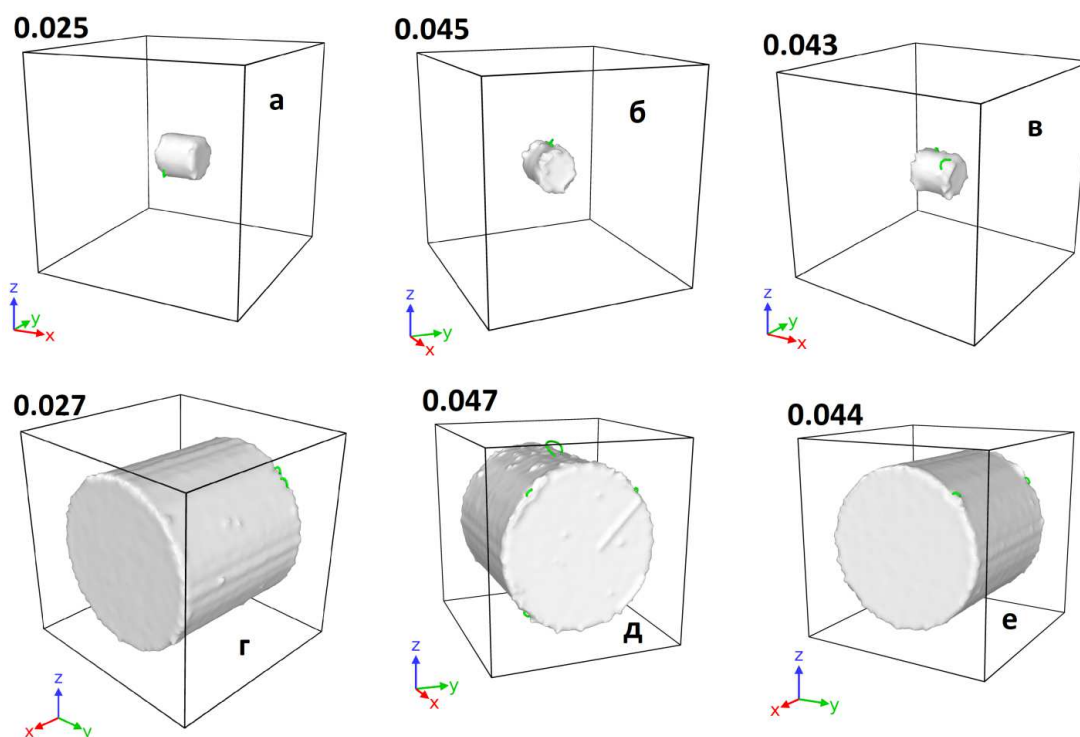


Рис. 3. Моменты зарождения дислокаций алюминия с цилиндрическими порами: (а, г) одноосное  $[100]$  сжатие (вдоль оси цилиндра), (б, д) одноосное  $[010]$  сжатие (перпендикулярно оси цилиндра) и (в, е) всестороннее сжатие.

На рис. 4 и 5 сравнивается эволюция МД систем со сферическими, кубическими и цилиндрическими порами. Эволюция напряжений в системе с малыми порами практически не зависит от ее формы, за исключением случая бокового  $[010]$  сжатия цилиндрических пор, рис. 4(а). Это связано с тем, что схлопывание мелких пор действует только как триггер пластического течения, которое релаксирует среднюю сдвиговую составляющую напряжения в случае одноосного нагружения и не изменяет давление в случае всестороннего нагружения. В случае крупных пор их схлопывание является преобладающим процессом. Начальный линейный рост напряжения прерывается зарождением и испусканием дислокаций. Момент перехода к пластическому течению зависит от формы пор. После этого момента напряжения падают и в дальнейшем остаются близкими к определенному уровню вплоть до схлопывания поры. После схлопывания происходит быстрое увеличение напряжения в сплошном материале.

Исследовано влияния размера системы и скорости деформации на динамику сжатия пористого алюминия, рис. 6. Пропорциональное увеличение размера пор и размера системы при постоянной начальной пористости снижает порог испускания дислокаций и высоту пика

напряжений, а последующая эволюция близка для разных систем и лежит в пределах статистического разброса.

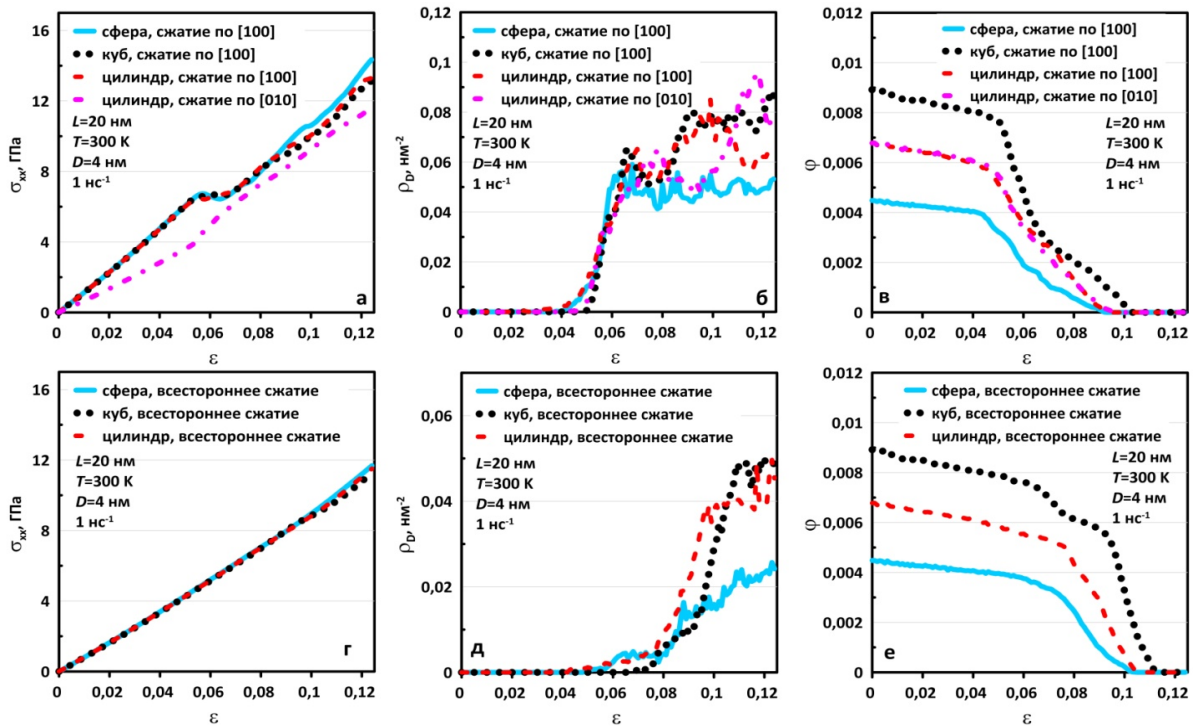


Рис. 4. Сравнение продольного напряжения (а, г), плотности дислокаций (б, д) и пористости (в, е) в алюминии с порами малого размера 4 нм для случаев (а, б, в) одноосного [100] сжатия и (г, д, е) всестороннего сжатия при 300 К.

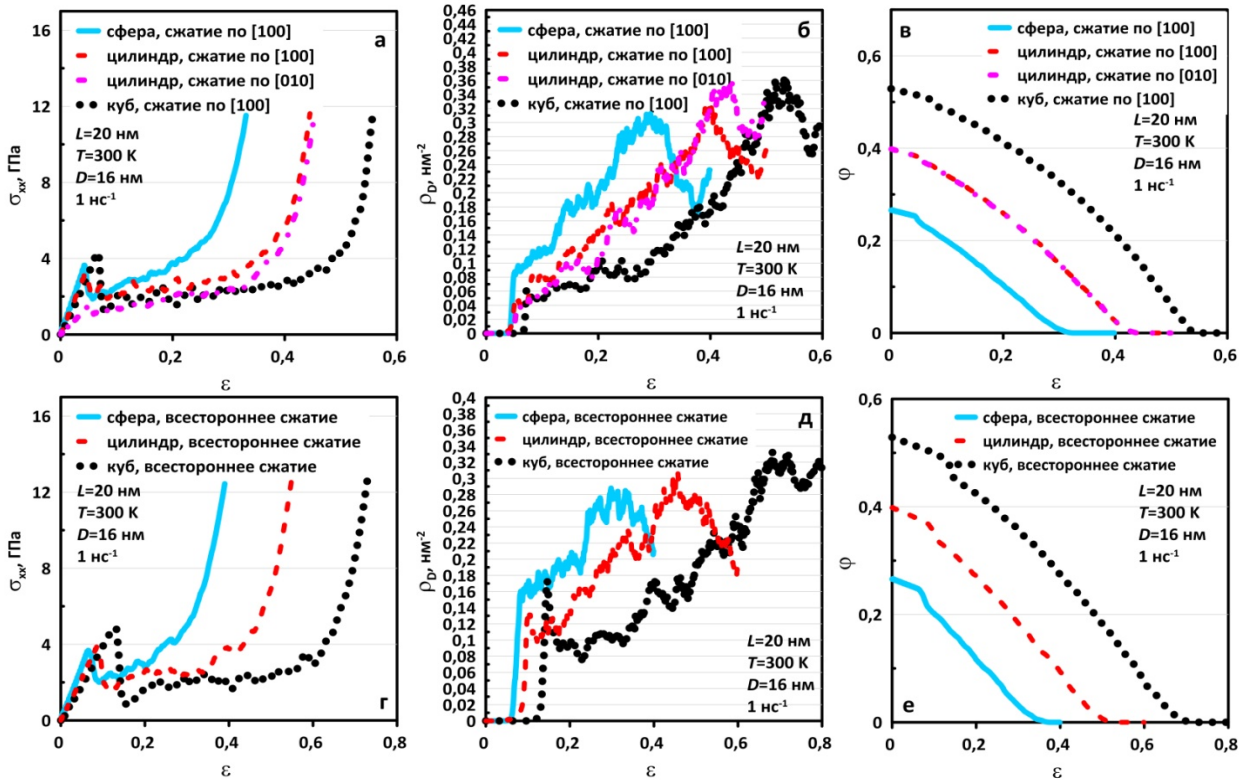


Рис. 5. Сравнение продольного напряжения (а, г), плотности дислокаций (б, д) и пористости (в, е) в алюминии с порами большого размера 16 нм для случаев (а, б, в) одноосного [100] сжатия и (г, д, е) всестороннего сжатия при 300 К.

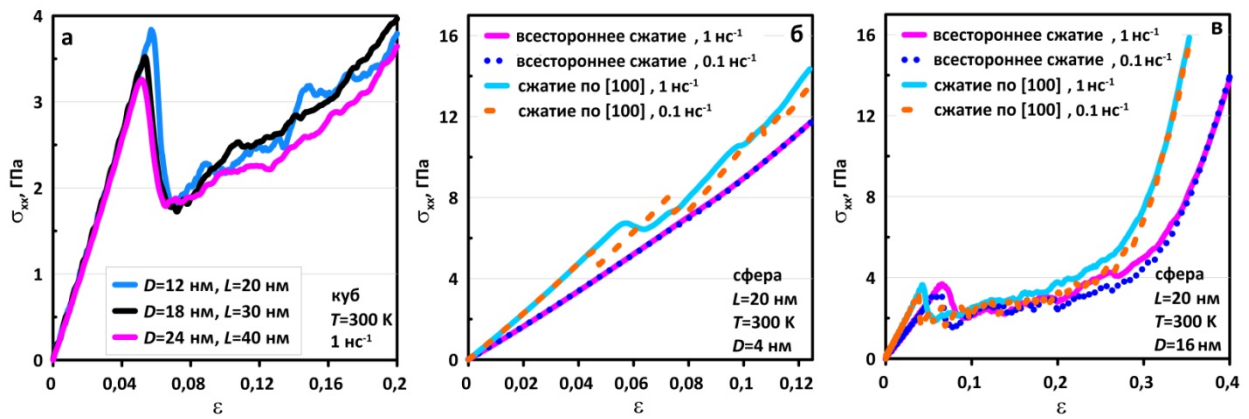


Рис. 6. Сравнение кривых напряжение-деформация пористого алюминия для: (а) трех различных размеров системы при постоянной начальной пористости; (б, в) для случая сжатия с разными скоростями деформации.

Уменьшение скорости деформации снижает порог испускания дислокаций примерно на 10-20%. В целом, увеличение размера системы или уменьшение скорости деформации приводит к более раннему переходу к пластическому течению и меньшему упругому пику на кривых напряжений при большей начальной пористости, тогда как последующая эволюция практически не меняется.

Также проводились МД расчеты для магния с нанопорами различных размеров при сжатии по различным кристаллографическим направлениям и для нанопористой меди, как в случае сжатия, так и растяжения материала.

**В третьей главе** приведена микромеханическая модель и аппроксимация МД результатов нейронной сетью.

Для аппроксимации результатов МД по деформационному поведению нанопористого алюминия используется ИНС с прямой связью, рис. 7.

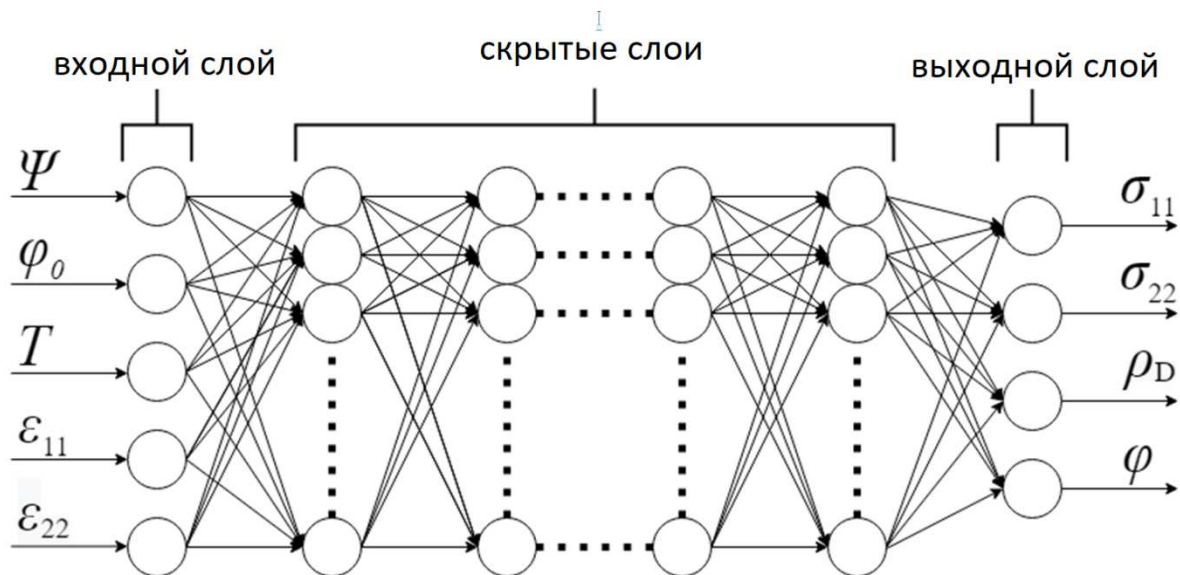


Рис. 7. Структура искусственной нейронной сети



Исходная пористая структура материала характеризуется начальной пористостью и коэффициентом формы, который определяется как отношение площади поверхности рассматриваемых пор к площади поверхности сферических пор того же объема. На вход подаются исходная пористость, коэффициент формы, температура, продольная деформация и поперечная деформация, образующие вектор входных значений. Выходной вектор, состоящий из продольных и поперечных напряжений, а также плотности дислокаций и пористости, образует выходной слой. Имеется 4 скрытых слоя, состоящих из заданного числа нейронов, что равно 30 для каждого скрытого слоя. Структура ИНС подбиралась для обеспечения точности при минимальной вычислительной сложности.

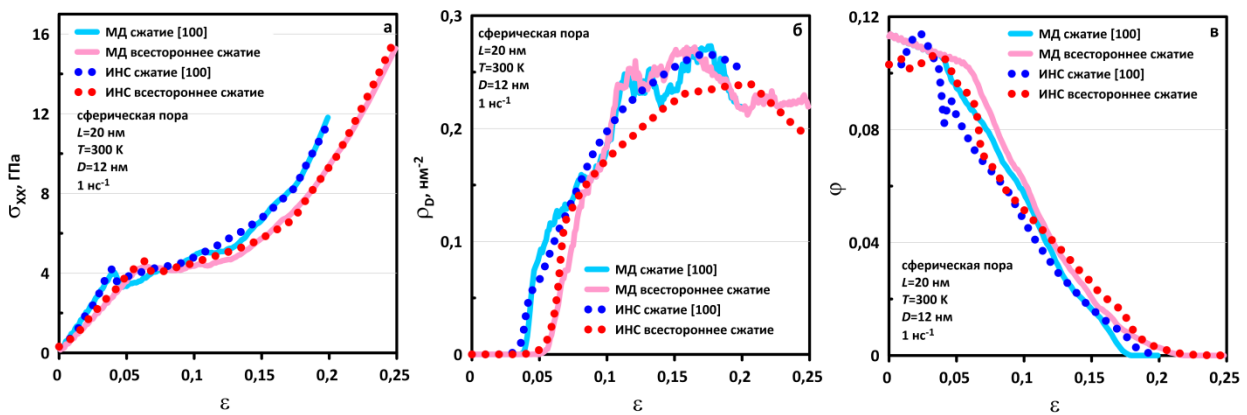


Рис. 8. Результаты аппроксимации ИНС в сравнении с проверочными данными МД моделирования для случая сжатия системы со сферической порой диаметром 12 нм при различных температурах: Показана эволюция напряжений (а), плотность дислокаций (б) и пористость (в) с приложенной деформацией.

Сигналы нейронов вычисляются с помощью формулы:

$$N_j^l = f\left(\sum_k \omega_{jk}^l N_k^{l-1} + b_j^l\right), \quad l = 2, K, L \quad (1)$$

где  $f$ -активационная функция,  $b$ -смещения сигналов на каждом слое,  $\omega$ -веса, подбираемые в ходе обучения нейронной сети. Сигналы каждого нейрона с предыдущего слоя умножаются на весовые коэффициенты, затем производится суммирование этих произведений,

$$S_j^l = \sum_k \omega_{jk}^l N_k^{l-1} + b_j^l \quad l = 2, K, L \quad (2)$$

вычисленная сумма подается в активационную функцию, таким образом, определяется сигнал нейрона. В случае вычисления сигналов нейронов в скрытом слое использовалась функция активации Leaky RELU (или линейный выпрямитель):

$$f_l(S) = \begin{cases} S & \text{if } S \geq 0 \\ 0.01 * S & \text{if } S < 0 \end{cases}, \quad l = 2, K, L-1 \quad (3)$$

Сигналы нейронов выходного слоя вычислялись с помощью сигмоидальной функции активации т.к. она дает более сглаженную кривую:

$$f_L(S) = \frac{1}{1 + \exp(-S)} \quad (4)$$

Обучение ИНС состоит в подборе весов и смещений для оптимального соответствия параметрам вход-выход из набора обучающих данных. В работе используется алгоритм обратного распространения ошибки. На рис. 8 представлено сравнение результатов МД и аппроксимации этих результатов ИНС для проверочных данных (размер пор 12 нм), которые не использовались при обучении ИНС.

Перейдем к рассмотрению развитой микромеханической модели. Рассмотрим репрезентативный элемент пористой среды (аналогичный МД системе) в виде прямоугольного параллелепипеда с длинами ребер  $H_1$ ,  $H_2$  and  $H_3$ , по осям координат  $x_1$ ,  $x_2$  and  $x_3$ , соответственно, см. рис. 9.

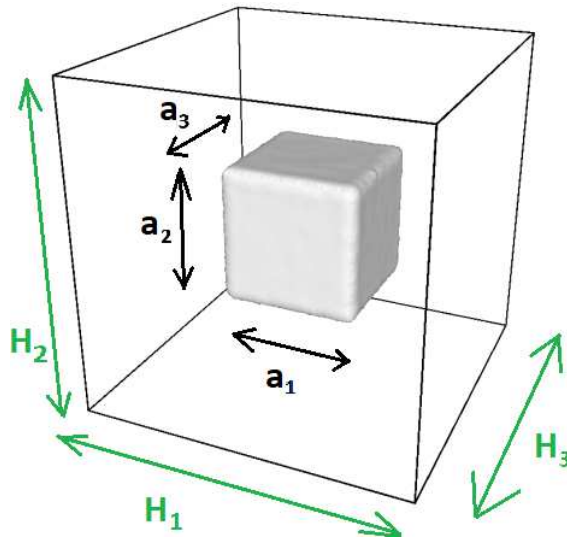


Рис. 9. Ячейка пористого алюминия с порой кубической формы.

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

Кинематика деформации репрезентативного объема описывается с помощью градиента деформации [13]:

$$F_{ik} = \frac{\partial x_k}{\partial X_i} \quad (5)$$

который можно представить в мультипликативной форме в следующем виде:

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}^e \cdot \mathbf{F}^p \cdot \mathbf{F}^d \quad (6)$$

где  $\mathbf{F}^e$  упругая часть, связанная с напряжениями,

$$F_{11}^e = (F_{11}^p F_{11}^d)^{-1} F_{11}, \quad F_{22}^e = F_{33}^e = (F_{22}^p F_{22}^d)^{-1} F_{22}, \quad (7)$$

$\mathbf{F}^p$  вклад макроскопической пластичности

$$K_{11}^p = \nu F_{11}^p, \quad K_{22}^p = -\frac{\nu}{2} F_{22}^p, \quad (8)$$

и  $\mathbf{F}^d$  вклад изменения размера и формы пор

$$K_{11}^d = \frac{K_{11}^d}{F_{11}^s} \left[ 1 - F_{11}^d F_{22}^d F_{33}^d \frac{V_0}{V_0^s} \right] + \frac{\kappa a_1 a_2 a_3}{F_{11}^s F_{22}^s F_{33}^s} \frac{F_{11}^d}{V_0^s}, \quad (9)$$

$$K_{22}^d = \frac{K_{22}^d}{F_{22}^s} \left[ 1 - F_{11}^d F_{22}^d F_{33}^d \frac{V_0}{V_0^s} \right] + \frac{\kappa a_1 a_2 a_3}{F_{11}^s F_{22}^s F_{33}^s} \frac{F_{22}^d}{V_0^s}$$

Часть деформации среды, связанная с изменением пор, характеризуется  $\mathbf{F}^d$ , в то время как остальная часть

$$\mathbf{F}^s = \mathbf{F}^e \cdot \mathbf{F}^p = \mathbf{F} \cdot (\mathbf{F}^d)^{-1} \quad (10)$$

описывает деформацию твердой фазы. Все рассматриваемые градиенты деформации являются усредненными по объему репрезентативного элемента и отражают усредненную реакцию пористой среды.

Диагональные компоненты упругого градиента определяют компоненты тензора деформации Грина-Лагранжа:

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

и макроскопические напряжения в твердой фазе, по закону Гука:

$$\sigma_{11}^s = \left[ (K + 4G/3) E_{11} + 2(K - 2G/3) E_{22} \right], \quad (12)$$

$$\sigma_{22}^s = \left[ (K - 2G/3) E_{11} + 2(K + G/3) E_{22} \right],$$

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

$$\sigma_{11} = (1 - \varphi) \sigma_{11}^s, \quad \sigma_{22} = (1 - \varphi) \sigma_{22}^s, \quad (13)$$

где  $\varphi = V^d/V$  пористость. Множитель  $(1 - \varphi)$  в уравнении. (13), необходим в связи с тем, что напряжения создаются внутри металла, занимающего эту часть общего объема.

Скорость пластической деформации рассчитывается на основе модифицированной модели релаксации Максвелла, предложенной в [14]:

$$\dot{\epsilon} = \eta^{-1} \left( \frac{3}{4} S - \frac{1}{2} Y \cdot \text{sign}(S) \right) \Theta \left( \frac{3}{4} |S| - \frac{1}{2} Y \right), \quad (14)$$

где  $S = (2/3)(\sigma_{11}^s - \sigma_{22}^s)$  девиатор напряжений,  $\Theta(\bullet)$  это ступенчатая функция Хевисайда,  $Y$  статический предел текучести, который зависит от плотности дислокаций  $\rho_D$  по закону упрочнения Тейлора:  $Y = \alpha G b \sqrt{\rho_D}$ , и  $\eta$  коэффициент вязкости, который пропорционален времени релаксации и обратно пропорционален плотности дислокаций [15]:

$$\eta^{-1} = \frac{b^2 \rho_D}{4B}. \quad (15)$$

где  $b$  модуль вектора Бюргера дислокаций,  $\alpha$  коэффициент упрочнения и  $B$  коэффициент трения дислокаций.

Следуя концепции, введенной [16], выделяют пластически стабилизированную форму пор, характеризующуюся размерами  $a_1^p$  и  $a_2^p = a_3^p$ , которые отличаются от текущих размеров  $a_1$  и  $a_2 = a_3$ . Оценить разницу между текущим и пластически стабилизированным размерами можно следующим выражением [16]:

$$a_{1,2} = \left( a_{1,2}^p - \frac{\gamma}{G} \right) \left[ 1 + P \left( \frac{1}{4G} + \frac{1}{3K} \right) \right]^{-1}, \quad (16)$$

а касательные напряжения  $\tau_1$  и  $\tau_2$  в непосредственной близости от пор равны

$$\tau_{1,2} = 3G \left( 1 + \frac{P}{3K} - \frac{G a_{1,2}^p}{G a_{1,2}^p - \gamma} \left[ 1 + P \left( \frac{1}{4G} + \frac{1}{3K} \right) \right] \right), \quad (17)$$

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

Скорость изменения размера пор находится как:

$$\dot{a}_{1,2}^p = a_{1,2}^p \dot{\epsilon}_{1,2}, \quad (18)$$

где толщина зоны пластического течения аппроксимируется как  $a_{1,2}^p$ ,  $\dot{\epsilon}_{1,2}$  – скорость пластической деформации в окрестности пор:

$$\dot{\epsilon}_{1,2} = \eta^{-1} \left( \tau_{1,2} - \frac{1}{2} Y \cdot \text{sign}(\tau_{1,2}) \right) \Theta \left( |\tau_{1,2}| - \frac{1}{2} Y \right). \quad (19)$$

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



$$\rho_D = \frac{1}{\varepsilon_m} \left( (\tau_1 \dot{\varepsilon}_1 + \tau_2 \dot{\varepsilon}_2) \frac{\varphi}{2} + \frac{3}{2} S \dot{\varepsilon} \right) - k_a \rho_D \left( (|\dot{\varepsilon}_1| + |\dot{\varepsilon}_2|) \frac{\varphi}{2} + |\dot{\varepsilon}| \right) + q_n, \quad (20)$$

где  $\varepsilon_m$  эффективная энергия образования дислокационной линии единичной длины (энергия размножения дислокаций),  $k_a$  коэффициент аннигиляции и  $q_n$  скорость зарождения (эмиссии) дислокаций. Множитель  $\varphi/2$  учитывает тот факт, что пластическая деформация при схлопывании поры происходит в объеме, сравнимом с объемом поры. В монокристаллическом материале зарождение (испускание) дислокаций с поверхности пор вызывает пластическое течение и схлопывание пор. Скорость зарождения описывается аналогично [16]:

$$q_n = \sum_j \frac{\pi a_c}{H_1 H_2} \delta(t - t_j). \quad (21)$$

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

$$\int_{t_{j-1}}^{t_j} \frac{2\pi a_1^p a_2^p b c_t}{a_c^1} \exp\left(\frac{\pi \varepsilon_n a_c}{2k_B T}\right) dt = 1. \quad (22)$$

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

В настоящей работе был использован алгоритм Байеса для автоматической идентификации параметров модели. Множество наборов параметров генерируется случайным образом в пределах некоторого предполагаемого диапазона. Прогноз модели для каждого набора параметров сравнивается с эталонными данными, которые в нашем случае являются результатами МД. Степень соответствия характеризуется вероятностью  $p$ , которая изначально предполагается единичной для каждого набора параметров и при сравнении с МД уменьшается в соответствии с разницей между моделью и МД по следующей формуле:

$$p = \prod_{k=1, k_0} \exp \left\{ -0.01 \cdot \left[ \left( \frac{\varphi^{\text{model}} - \varphi^{\text{MD}}}{\Delta \varphi^{\text{MD}}} \right)^2 + \left( \frac{\sigma_{11}^{\text{model}} - \sigma_{11}^{\text{MD}}}{\Delta \sigma_{11}^{\text{MD}}} \right)^2 + \left( \frac{\sigma_{22}^{\text{model}} - \sigma_{22}^{\text{MD}}}{\Delta \sigma_{22}^{\text{MD}}} \right)^2 + \left( \frac{\rho_D^{\text{model}} - \rho_D^{\text{MD}}}{\Delta \rho_D^{\text{MD}}} \right)^2 \right] \right\} \quad (23)$$

где  $\Delta\varphi^{\text{MD}}$ ,  $\Delta\sigma_{11}^{\text{MD}}$ ,  $\Delta\sigma_{22}^{\text{MD}}$  и  $\Delta\rho_{\text{D}}^{\text{MD}}$  диапазоны соответствующих значений из МД. Сравнение проводится с шагом 0,005 инженерной деформации по каждой траектории деформации. В случае алюминия данные МД для различной формы пор и размеров 4, 8 и 16 нм, а также двух различных режимов нагружения (одноосное и всестороннее) используются для идентификации параметров модели. Идентифицируемые параметры: коэффициент поверхностного натяжения  $\gamma$ , энергии размножения дислокаций  $\varepsilon_{\text{m}}$  и энергии нуклеации  $\varepsilon_{\text{n}}$ , коэффициент упрочнения  $\alpha$  и коэффициент аннигиляции  $k_{\text{a}}$ . Полученное распределение вероятности в пространстве параметров представлено на рис. 10.

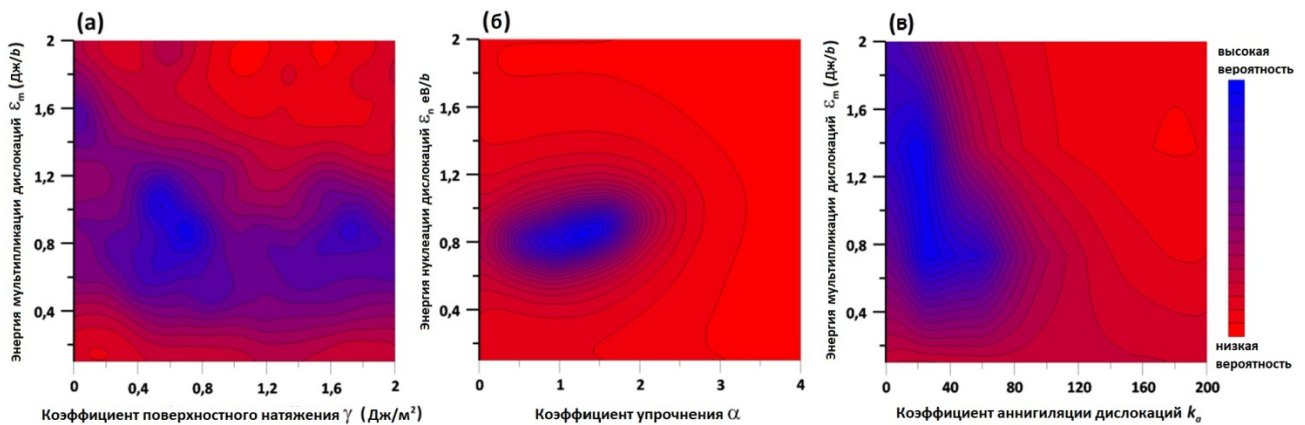


Рис. 10. Результаты алгоритма Байеса: распределение вероятностей в пространстве параметров.

После идентификации параметров, проводилась проверка прогноза модели для случая 12-нм пор, которые не использовались для «обучения» модели. Сравнение модели и МД для этого случая показано на рис. 11. На рис. 11 видно, что модель адекватно описывает сжатие нанопористого алюминия. В рассматриваемом случае относительно больших пор, рис. 11, модель правильно предсказывает стадию схлопывания пор с практически постоянными напряжениями и последующим быстрым ростом напряжений после достижения нулевой пористости. Подчеркнем, что все представленные результаты получены при одном и том же наборе параметров модели для всех рассматриваемых форм и диаметров пор и режимов сжатия (одноосного и гидростатического).

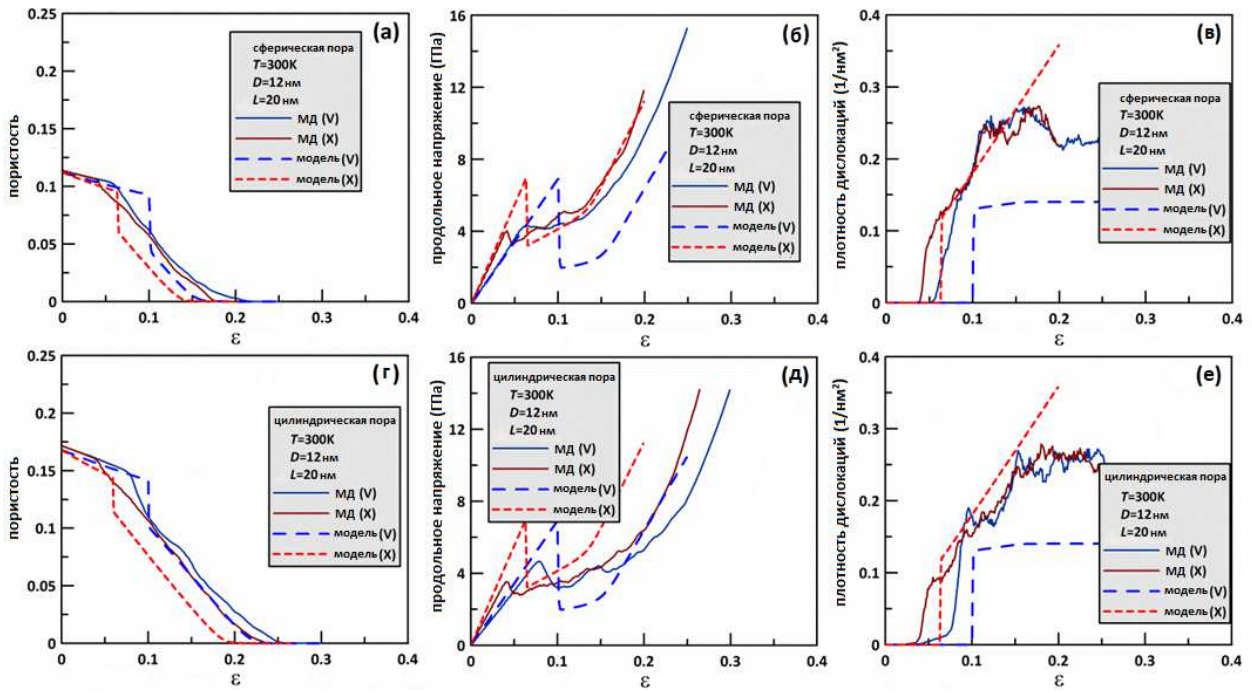


Рис. 11. Результаты микромеханической модели (КМ) в сравнении с эталонными данными МД моделирования для случая сжатия системы с порами разной формы и размером 12 нм.

Помимо алюминия, ИНС была обучена для случая сжатия нанопористого магния с учетом анизотропии его реакции при одноосном сжатии по различным кристаллографическим направлениям. Для случая нанопористой меди проводилось обучение более простого варианта микромеханической модели [17] методом наименьших квадратов с перебором параметров на сетке как описано в [17].

**Четвертая глава.** Разработанная ИНС и микромеханическая модель применяются для моделирования распространения ударной волны в нанопористом алюминии и магнии в рамках подхода механики сплошной среды. Базовая система законов сохранения механики сплошной среды [18] численно интегрируется по времени на пространственной сетке с использованием конечных разностей. Параллельно с этим либо ИНС, либо микромеханическая модель используются для расчета текущих напряжений в каждой ячейке числовой сетки на каждом временном шаге. В условиях одномерного движения вещества вдоль оси  $x_1$  с вектором скорости  $\{u_1, 0, 0\}$  в плоской ударной волне законы сохранения приводят к следующим трем скалярным уравнениям:

$$\frac{\partial \rho^a}{\partial t} + \rho^a \frac{\partial u_1}{\partial x_1} = 0, \quad \frac{\partial E}{\partial t} + \frac{1}{\rho^a} \frac{\partial}{\partial x_1} (\sigma_{11} + q) = 0, \quad \frac{\partial (\sigma_{11} + q)}{\partial t} + (\sigma_{11} + q) \frac{\partial \rho^a}{\partial x_1} = 0, \quad (24)$$

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

$$T = T_0 + (E - E_0) c_v^{-1}, \quad (25)$$

где  $c_V \approx 920 \text{ J}/(\text{kg}\times\text{K})$  удельная теплоемкость алюминиевой матрицы,  $T_0$  и  $E_0$  начальная температура и энергия, соответственно. Соотношение текущего размера ячейки  $\Delta x_1$  к начальному  $\Delta x_{10}$  позволяет оценить как инженерные деформации  $\varepsilon_{11} = \Delta x_1/\Delta x_{10} - 1$ ,  $\varepsilon_{22} = \varepsilon_{33} = 0$  необходимые для ИНС, так и макроскопические градиенты деформации  $F_{11} = \Delta x_1/\Delta x_{10}$ ,  $F_{22} = F_{33} = 1$ , требуемые для микромеханической модели. Вязкое напряжение  $q$  в уравнениях (24) стабилизирует численные колебания на фронте ударной волны и делает толщину ударного фронта конечной, оно рассчитывается как

$$q = \eta^* \frac{\partial u_1}{\partial x_1} \quad (26)$$

с коэффициентом  $\eta^* = (3\Delta x_1)\rho^a u^{\text{SW}}$ , где  $u^{\text{SW}}$  скачок скорости в ударной волне.

Результаты континуального моделирования, полученные с использованием микромеханической модели или ИНС, сравниваются с прямым моделированием этого процесса с помощью МД, см. рис. 12.

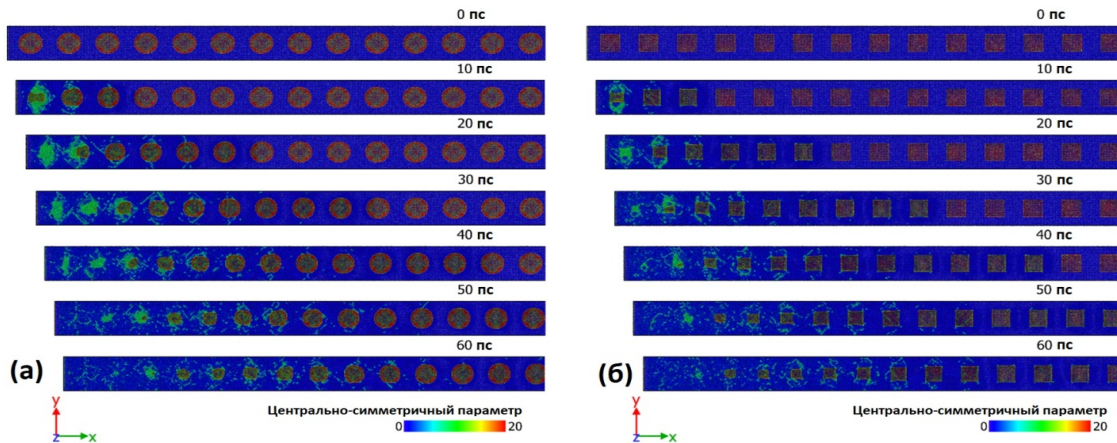


Рис. 12. МД-моделирование распространения ударной волны в алюминии со сферическими (а) и кубическими (б) нанопорами; начальная пористость в обоих случаях составляет около 11%. Поршень, движущийся с левой стороны, создает ударную волну со скачком скорости 500 м/с.

Рассматриваются образцы вытянутой формы длиной 600 нм вдоль направления ударной волны (вдоль оси  $x_1$ ) и поперечного сечения  $20\times 20 \text{ nm}^2$  с периодически расположенными сферическими, цилиндрическими или кубическими порами с пористостью около 11%. После этого образцы нагружаются поршнем, движущимся с постоянной скоростью  $u^{\text{SW}}$  вдоль оси  $x \equiv x_1$ , периодические граничные условия задаются для перпендикулярных направлений. Это нагружение создает плоскую ударную волну со скачком скорости  $u^{\text{SW}}$ . Каждая МД система содержит около 13,3 млн атомов; рассматриваются скорости поршня 300, 500 и 1000 м/с. Примеры атомных конфигураций в

последующие моменты времени для случаев сферических и кубических нанопор представлены на рис. 12 для скачка скорости 500 м/с. Видно постепенное сжатие пор за фронтом волны сжатия.

Сравнение моделирования с использованием ИНС либо микромеханической модели в качестве определяющего уравнения с результатами прямого МД моделирования, показано на рис. 13 и свидетельствует об адекватности обеих развитых теоретических моделей на основе машинного обучения для описания динамического сжатия нанопористого металла в ударной волне. Сравнение континуального моделирования с обученной ИНС в качестве определяющего уравнения нанопористого магния также показывает соответствие МД.

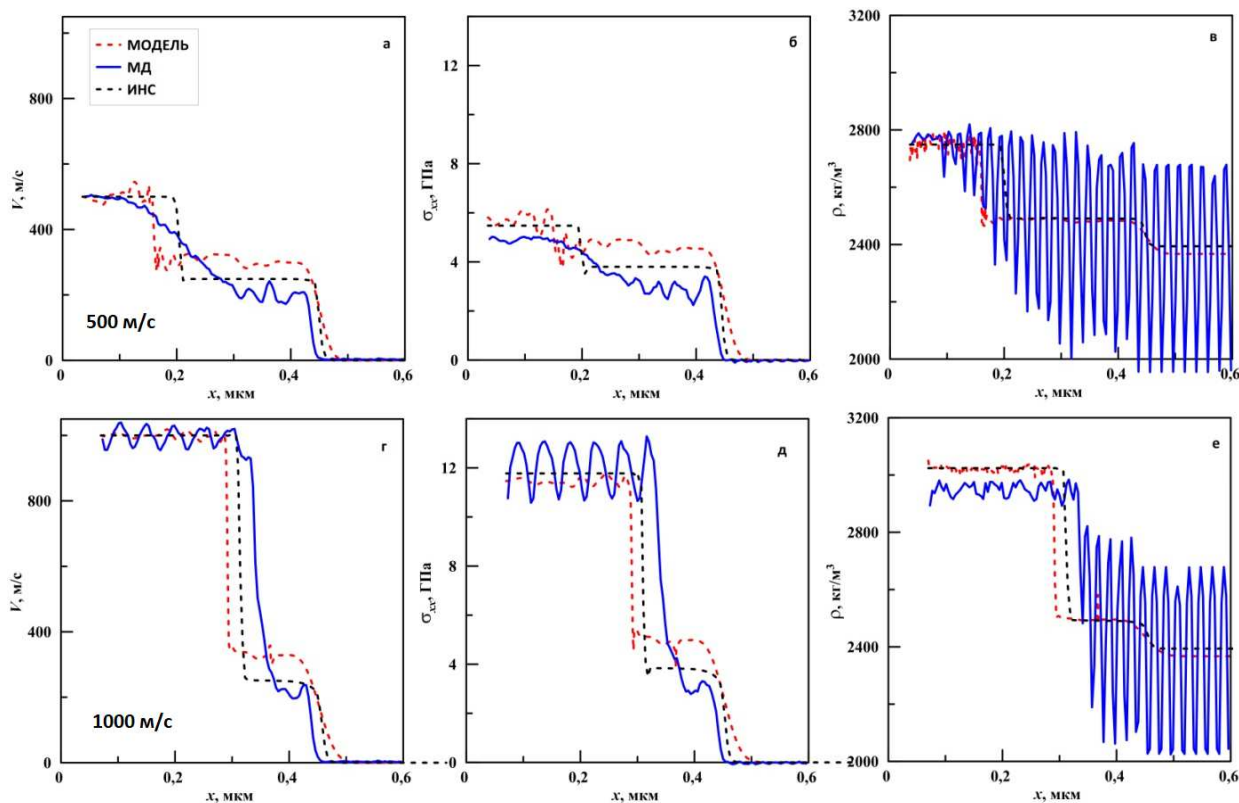


Рис. 13. Ударные волны со скачками скорости 500 м/с (а-в) и 1000 м/с (г-е) в алюминии со сферическими нанопорами с начальной пористостью 11 %: МД-моделирование (синие сплошные линии), ИНС (черные пунктирные линии) микромеханическая модель (красные пунктирные линии) для скорости вещества (а, г), продольного напряжения (б, д) и средней плотности материала (в, е).

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

Первый теоретический метод состоит в прямой аппроксимации деформационного поведения с помощью искусственной нейронной сети (ИНС), которая далее используется как определяющее уравнение материала. ИНС не содержит физических представлений об

описываемом процессе, но большое количество параметров искусственных нейронов делает ее гибким инструментом отображения сложных зависимостей.

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

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

**Список публикаций автора по теме диссертации:** *Статьи в журналах, входящих в систему цитирования Scopus и приравненных к рекомендованным ВАК Минобрнауки РФ:*

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

*Тезисы и статьи в сборниках трудов и докладов международных и всероссийских научных конференций*

1. Латыпов, Ф.Т. Гомогенное зарождение дислокаций и сдвиговая прочность металлов при одноосной деформации и чистом сдвиге / Ф.Т. Латыпов // Математическое моделирование в естественных науках. Материалы XXIII Всероссийской школы-конференции молодых ученых и студентов. – 2015. – С.331.



2. Latypov, F.T. Homogeneous nucleation of dislocations in metals under uniaxial deformation and pure shear / F.T. Latypov, A.E. Mayer // XXX International Conference on Interaction of Intense Energy Fluxes with Matter. – 2015. – P.90.
3. Latypov, F.T. Molecular dynamic and continuum modelings of nanopore growth in copper at high-rate tension / F.T. Latypov, V.S. Krasnikov, A.E. Mayer //XXXI International Conference on Equations of State for Matter. –2016. – P.156.
4. Latypov, F.T. Molecular dynamic and continuum modelings of nanopore growth in copper at high-rate tension / F.T. Latypov, V.S. Krasnikov, A.E. Mayer // NCSM 30: The 30th Nordic Seminar on Computational Mechanics. – 2017. – P.111.
5. Латыпов, Ф.Т. Моделирование коллапса нанопор в металлах при высокоскоростном сжатии / Ф.Т. Латыпов // 19-я Международная конференция «Авиация и космонавтика». – 2020. – С.571.
6. Латыпов Ф.Т. Пластическое компактирование пористых металлов с разными типами кристаллических решеток / Латыпов Ф.Т., Майер А.Е., Красников В.С. // Перспективные материалы и технологии: Материалы международного симпозиума. – 2021. – С.176.
7. Латыпов Ф.Т. Моделирование сжатия пористых металлов при высокоскоростной деформации / Ф.Т. Латыпов, А.Е. Майер, Е.В. Фомин, В.С. Красников // Актуальные вопросы прочности: Сборник тезисов LXIV Международной конференции. – 2022. – С.53.
8. Латыпов Ф.Т. Динамическая деформация пористых металлов: молекулярно-динамическое исследование, теоретические модели и машинное обучение/ Ф.Т. Латыпов, А.Е. Майер, Е.В. Фомин, В.С. Красников // Физическая мезомеханика материалов. Физические принципы формирования многоуровневой структуры и механизмы нелинейного поведения: Тезисы докладов международной конференции. – 2022. – С.159.

#### **Список литературы:**

1. Kirkland N.T. Synthesis and properties of topologically ordered porous magnesium / N.T. Kirkland, I. Kolbeinsson, T. Woodfield, G.J. Dias, M.P. Staiger // Materials Science and Engineering: B. – 2011. – V. 176(20). – P. 1666-1672.
2. Bram, M. High-porosity titanium, stainless steel, and superalloy parts / M. Bram, C. Stiller, H.P. Buchkremer, D. Stover, H. Baur // Advanced Engineering Materials. – 2000. – V. 2(4) – P. 196-199.
3. Banhart, J. Production of Metal Foams / J. Banhart // Comprehensive Composite Materials II. – 2018. – V.4. – P. 347–363.
4. Costanza, G. Experimental Set-Up of the Production Process and Mechanical Characterization of Metal Foams Manufactured by Lost-PLA Technique with Different Cell Morphology / G. Costanza, A. Del Ferraro, M.E. Tata // Metals. – 2022. – V.12. – P.1385.
5. Deshpande, V. Isotropic constitutive models for metallic foams / V. Deshpande, N. Fleck // Journal of the Mechanics and Physics of Solids.–2000 –V.48. –P.1253-1283.
6. Kadkhodapour, J. Micro–macro investigation of deformation and failure in closed-cell aluminum foams / J. Kadkhodapour, S. Raeisi // Computational Materials Science.– 2014– V.83–P.137-148.
7. Kidger, P. Universal approximation with deep narrow networks / P. Kidger, T.J. Lyons //CoRR – 2019.

8. Mayer, A.E. Micromechanical model of nanoparticle compaction and shock waves in metal powders/ A.E. Mayer // *International Journal of Plasticity*. – 2021. – V.147. – P. 103102.
9. Moshe, E. An increase of the spall strength in aluminum, copper, and Metglas at strain rates larger than  $10^7 \text{ s}^{-1}$  / E. Moshe, S. Eliezer, E. Dekel, A. Ludmirsky, Z. Henis, M. Werdiger, I.B. Goldberg, N. Eliaz, D. Eliezer // *Journal of Applied Physics*. – 1998. – V.83(8). – P.4004-4011.
10. Werdiger, M. Al and Cu dynamic strength at a strain rate of  $5 \cdot 10^8 \text{ s}^{-1}$  / M. Werdiger, S. Eliezer, E. Moshe, Z. Henis, E. Dekel, Y. Horovitz, B. Arad // *AIP Conference Proceedings*. – 2002. – V. 620. – P. 583.
11. Apostol, F. Interatomic potential for the Al-Cu system / F. Apostol, Y. Mishin // *Physical Review B*. – 2011. – V.83. – P.054116.
12. Smirnova, D. E. New interatomic potential for simulation of pure magnesium and magnesium hydrides / D. E. Smirnova, S. V. Starikov, A.M. Vlasova // *Computational Materials Science*.–2018. – V. 154. – P. 295–302.
13. Mase G.E. *Theory and Problems of Continuum Mechanics*. / Mase G.E. // McGraw-Hill – New York. – 1970.
14. Popova, T.V. Evolution of shock compression pulses in polymethylmethacrylate and aluminum / T.V. Popova, A.E. Mayer, K.V. Khishchenko // *Journal of Applied Physics*.– 2018. – V.123 (23). –P. 235902.
15. Selyutina, N. The definition of characteristic times of plastic relaxation by dislocation slip and grain boundary sliding in copper and nickel / N. Selyutina, E.N. Borodin, Y. Petrov, A.E. Mayer // *International Journal of Plasticity*. – 2016 – V. 82 – P. 97–111
16. Krasnikov, V.S. Plasticity driven growth of nanovoids and strength of aluminum at high rate tension: Molecular dynamics simulations and continuum modeling / V.S. Krasnikov, A.E. Mayer // *International Journal of Plasticity*. – 2015. – V.74. – P. 75-91.
17. Latypov F.T. Dynamics of growth and collapse of nanopores in copper / F.T. Latypov, A.E. Mayer, V.S. Krasnikov // *International Journal of Solids Structures*.– 2020. – V. 202. – P. 418–433.
18. Kuropatenko V.F. New models of continuum mechanics. // *Journal of Engineering Physics and Thermophysics*. – 2011. – V. 84. – P. 77-99.