

Совершенствование моделей прочности и разрушения материалов с использованием алгоритмов машинного обучения

С. Ю. Григорьев¹ и С. А. Дьячков^{1,2}

¹ Федеральное государственное унитарное предприятие Всероссийский научно-исследовательский институт автоматики им. Н.Л. Духова, Сущевская ул., 22, Москва 127055, Россия

² Объединенный институт высоких температур РАН, Ижорская ул., 13, стр.2, Москва 125412, Россия

E-mail: sergei.dyachkov@phystech.edu

Статья поступила в редакцию 5 декабря 2022 г.

Аннотация. Представлены результаты исследований по разработке методик усовершенствования материальных моделей в контексте задач, связанных с физикой высоких плотностей энергии и интенсивных динамических воздействий. Разработан алгоритм машинного обучения для материальных моделей разной степени сложности с использованием прямых данных ударно-волновых экспериментов (профилей скорости ударно-нагруженных образцов). Суть алгоритма состоит в проведении прямого численного моделирования методами механики сплошной среды с изменяющимися в ходе оптимизации параметрами моделей материалов с целью наиболее точного воспроизведения профилей скорости. Алгоритм протестирован на примере определения константных наборов упругопластических моделей, моделей разрушения и откола. Использование такого рода алгоритмов позволяет автоматизировать процедуру определения константных наборов для материальных моделей, и может использоваться совместно с базами данных свойств материалов для эволюционного улучшения параметров моделей по мере увеличения объема данных. <https://doi.org/10.33849/2022107>

1. ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время машинное обучение применяется во многих областях науки, а также в практических приложениях, таких как технологии компьютерного зрения, обработки языков и др. Основной задачей машинного обучения является построение математической модели с набором управляемых параметров, которая аппроксимирует некий набор данных с заданной точностью. Путем подбора архитектуры модели (вид аппроксимирующей функции) и оптимизации управляемых параметров можно достичь высокой степени точности при описании данных любой сложности. До недавнего времени наиболее успешный опыт применения моделей машинного обучения был достигнут при решении различных задач классификации, то есть задач, где входные и выходные данные модели представляют собой дискретные множества. В случае, когда входные и выходные данные представляют собой континуальные множества, требования к точности модели во всей области значений удовлетворить значительно сложнее. В основном, именно такие данные необходимо описывать при решении задач математического моделирования физических процессов.

Модели машинного обучения создаются на основе данных и некоторых закономерностей в них. Физические законы, в свою очередь, описываются некоторыми уравнениями (часто — дифференциальными уравнениями в частных производных). Как правило, закономерности в данных, выявленные моделями машинного обучения, не описываются такими уравнениями, а являются некой искусственно созданной абстракцией. Следовательно, модели машинного обучения не отражают физические законы по умолчанию, а результаты их работы могут быть существенно “нефизичны”. Например, на предсказанных данных не выполняются законы сохранения. Чтобы решить данную проблему, было раз-

работано множество методов. В обзоре [1] они классифицируются следующим образом:

1. **Наблюдательные** (англ. *Observational biases*), когда физические закономерности явно отражены в данных. Обучение на таких данных, как правило, позволяет моделям выявлять функции и операторы, отражающие физику в них.
2. **Индуктивные** (англ. *Inductive biases*), когда некоторые предположения насчет физических закономерностей включены в архитектуру машинного обучения. Тогда, за счет выбора специальной архитектуры, возможно добиться неявного выполнения некоторых физических законов.
3. **Обучаемые** (англ. *Learning biases*), когда в функцию ошибок добавляются члены, явно отвечающие соблюдению какого-либо равенства, взятого из некоторого физического уравнения.

При численном моделировании задач физики высоких плотностей энергии и интенсивных динамических воздействий существенную роль играют модели материалов [2]. Содержательный анализ и количественное описание таких явлений, как взрыв, ударные волны, воздействие мощных лазерных импульсов на вещество, возможны только с использованием современных численных методов путем решения нестационарных многомерных уравнений механики сплошной среды, дополненных материальными моделями, под которыми понимаются уравнения состояния вещества, а также соотношения, определяющие упругопластическое течение, процессы разрушения, откола и фрагментации и т.д. Достоверный количественный анализ рассматриваемых явлений определяется двумя ключевыми факторами, а именно, качеством решения уравнений динамики сплошной среды и качеством материальных моделей, которые определяют механические и тепловые свойства вещества. В этой статье основное внимание уделяется второму:

качеству материальных моделей с акцентом, сделанным на случай конденсированных сред.

Несмотря на огромное количество оригинальных статей, обзорных работ и монографий, задача описания с единых позиций поведения материалов в конденсированной фазе при интенсивных импульсных воздействиях далека от решения. И тому есть несколько причин. Во-первых, это комплексность задачи: на поведение материалов влияет множество факторов, которые, к тому же, могут быть связаны нелинейно. Поэтому большинство из существующих моделей имеют феноменологический характер и способны описывать только отдельные аспекты поведения материалов. Во-вторых, для многих быстропротекающих процессов требуется учитывать сложную кинетику процессов (пластичности, фазовых переходов и т.п.), также важную роль начинает играть длительная память, которая связана с влиянием предыстории состояний на реакцию материала в текущий момент времени (что характерно для процессов разрушения). Таким образом, уточнение существующих моделей, а также создание новых, более качественных моделей материалов является важной составляющей для анализа процессов и явлений при интенсивных динамических нагрузках.

Особый интерес возникает и к разработке алгоритмов автоматизированного построения материальных моделей. По мере роста объема экспериментальных и расчетных данных о свойствах материалов появляется возможность непрерывно улучшать материальные модели: константные наборы для известных или разрабатываемых моделей можно определять с использованием современных вычислительных устройств и алгоритмов оптимизации. В общем случае процесс подбора констант и соответствующие алгоритмы относятся к области машинного обучения. В этой работе представлено описание подхода к оптимизации констант детерминированных материальных моделей на основе имеющегося набора разнородных данных, экспериментальных или полученных из более прецизионных расчетов. К таким данным можно отнести как статические (например, экспериментальные или расчетные данные по уравнению состояния вещества), так и динамические данные (например, нестационарные ударно-волновые профили скорости, полученные с использованием интерферометрических методик). В качестве примеров представлены результаты по оптимизации констант моделей пластичности, разрушения, и откола.

2. АЛГОРИТМ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ МАТЕРИАЛЬНЫХ МОДЕЛЕЙ

Очевидно, что качество моделирования большинства инженерных задач напрямую зависит от качества используемых материальных моделей. Для рассматриваемых в данной работе задач, связанных с физикой высоких плотностей энергии, к таким материальным моделям следует отнести уравнение состояния вещества, модели упругопластического деформирования, модели разрушения, откола, кинетики горения взрывчатых веществ и многое другое.

Поскольку большинство из этих моделей являются феноменологическими, т.е. опираются на экспериментальные данные, калибровка этих моделей становится

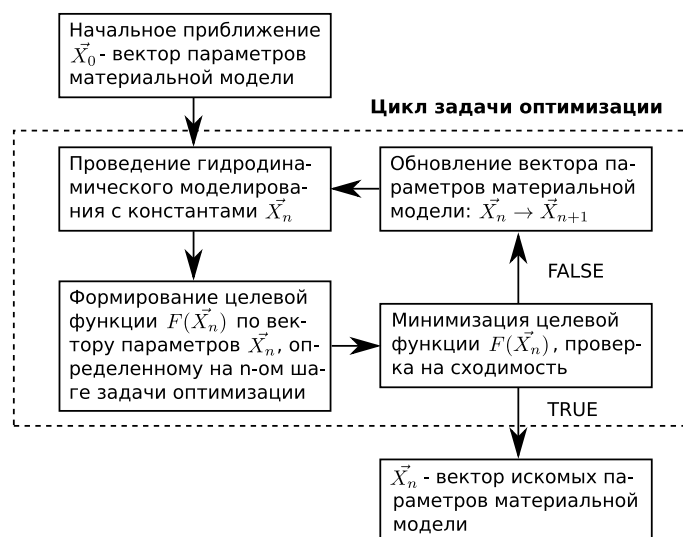


Рисунок 1. Блок-схема алгоритма поиска констант материальных моделей.

важной составляющей процесса моделирования. В лучшем случае (и, как правило, в наиболее простом), выбор констант моделей ограничивается проведением серии простых экспериментов, которые позволяют измерить все необходимые параметры моделей напрямую. К примеру, для определения модуля Юнга для упругих материалов, как правило, проводятся классические тесты на растяжение металлических образцов. Однако, в подавляющем большинстве случаев напрямую определить константы моделей из экспериментов не удастся. Поэтому требуется иной подход, который позволяет производить калибровку материальных моделей по имеющемуся неполному набору экспериментальных данных.

В литературе имеется описание различных подходов к калибровке материальных моделей, которые так или иначе сводятся к решению задачи нелинейной оптимизации [3–12]. Более или менее универсальную схему алгоритма можно представить в виде блок-схемы, приведенной на рисунке 1. На начальном этапе подбирается нулевое приближение вектора параметров \vec{X}_0 . Компонентами вектора \vec{X}_0 являются искомые константы модели: к примеру, предел текучести для модели идеального пластического тела. Начальное приближение, как правило, можно определить из физических соображений, в иных случаях можно задавать произвольные значения.

На следующем шаге необходимо провести гидродинамический расчет, в котором используются константы материальных моделей из начального приближения \vec{X}_0 . Тип гидродинамических расчетов определяется материальной моделью и будет более подробно обсуждаться далее для каждой конкретной задачи. Как правило, это достаточно простые нересурсоемкие расчеты, например, расчеты одномерных ударно-волновых экспериментов, в которых определяется нестационарный профиль скорости движения задней границы мишени.

Затем по результатам проведенных расчетов формируется целевая функция $F(\vec{X})$. В качестве целевой функции обычно берется среднее квадратичное отклонение результатов моделирования от эксперименталь-

ных данных. В отдельных случаях, когда калибровка модели производится по разнородным экспериментальным данным, целевая функция может состоять из нескольких слагаемых с разными весовыми коэффициентами. Наконец, для определенной таким образом функции $F(\vec{X})$ решается задача на нахождение ее минимума, т.е. определяется вектор \vec{X} , который дает минимальное отклонение от экспериментальных результатов.

В открытой литературе имеются работы, в которых представленный алгоритм используется для определения или уточнения констант моделей упруго-пластического течения [6, 9], уравнения состояния для продуктов деления взрывчатых веществ Джонса–Уилкинса–Ли (JWL) [13], а также кинетики горения взрывчатых веществ [4, 5, 7, 10–12]. Стоит при этом отметить, что представленный алгоритм подходит не только для калибровки материальных моделей, но также и для оптимизации инженерных конструкций. Например, в работах [3, 8] представленный алгоритм использовался для оптимизации конструкций зарядов для получения ударных ядер и кумулятивных струй с набором заданными характеристиками.

Важным фактором при калибровке констант материальных моделей является выбор целевой функции, для которой будет решаться задача нелинейной оптимизации. Конкретный ее вид будет определяться, во-первых, материальной моделью, для которой проводится калибровка параметров, во-вторых, имеющимися в наличии экспериментальными данными. Для большинства задач, рассматриваемых в данной работе, используются псевдоодномерные ударно-волновые эксперименты, которые представляют собой, как правило, эксперименты по соударению двух твердотельных образцов. Основным результатом таких экспериментов являются временные профили скорости движения задней границы мишени $U_{\text{exp}}^n \equiv U_{\text{exp}}(t^n)$, которые снимаются с использованием различных интерферометрических методов [14, 15]. Здесь U_{exp}^n — экспериментально измеренные значения скорости в дискретные моменты времени t^n . Такие профили дают косвенную информацию об уравнении состояния исследуемого материала, а также о его упруго-пластических и откольных свойствах.

Калибровка материальной модели состоит в следующем: на каждой итерации оптимизационной задачи проводится серия гидродинамических расчетов (как правило, нестационарных и одномерных) с некоторым вектором искомых параметров \vec{X}^n , определенным на итерации n , которые моделируют эксперименты. Таким образом осуществляется поиск параметров модели, которые дают наименьшее отклонение расчетов от экспериментальных результатов, т.е. дают наилучшее совпадение расчетного профиля скорости U_{sim}^n с экспериментальным U_{exp}^n , если калибровка производится только по ударно-волновым экспериментам. Для частного случая калибровки моделей по ударно-волновым профилям задачу оптимизации можно сформулировать следующим образом:

$$\min F(\vec{X}) \rightarrow \min \sum_{i=1}^{N_e} \sum_{j=1}^{N_i} \frac{\omega_{ij}}{N_i} \left| U_{ij}^{\text{exp}} - U_{ij}^{\text{sim}}(\vec{X}) \right|^\alpha, \quad (1)$$

где суммирование по индексу i соответствует сумми-

рованию по всем экспериментам, если их несколько, а индекс j соответствует j -ой экспериментальной точке профиля скорости i -го эксперимента; N_e — общее число экспериментов, N_i — количество точек в i -ом эксперименте. Весовые множители ω_{ij} , которые стоят под знаком суммирования, определяют вклад отдельных экспериментальных точек в целевую функцию. Как правило, $\omega_{ij} = 1$, однако при необходимости их можно сделать отличными от единицы. К примеру, для калибровки моделей упруго-пластичности или разрушения, в первую очередь, важно наиболее точно воспроизводить ударный фронт и профиль скорости в волне разгрузки, в то время как для уравнения состояния наиболее важна амплитуда импульса. Таким образом, в первом случае необходимо повышать значения коэффициентов ω_{ij} , которые соответствуют точкам на ударном фронте и в волне разрежения, во втором случае, наоборот, необходимо увеличивать коэффициенты ω_{ij} , которые соответствуют точкам с максимальным значением скорости. В случае откольных явлений наиболее информативными точками являются точки в волне разрежения, поэтому при калибровке модели откола желательнее увеличивать их относительный вес. Коэффициент $\alpha > 0$ в формуле (1) определяет “жесткость” весовой функции $F(\vec{X})$ и может влиять на скорость сходимости; как правило, $\alpha = 1$ или 2.

Ударно-волновые профили скорости предоставляют косвенную информацию об упруго-пластических и откольных свойствах материала, поэтому их удобно использовать для калибровки моделей пластичности, откола или разрушения. В тех случаях, когда в результате ударного сжатия происходит фазовый переход, это очень часто отражается и на форме ударного импульса, поэтому ударно-волновые профили скорости бывает удобно использовать также и для калибровки модели фазового перехода. Постановку задачи оптимизации в соответствии с формулой (1) можно использовать для калибровки модели уравнения состояния энергетических материалов (взрывчатых веществ). Однако в этом случае U^{exp} и U^{sim} соответствуют экспериментальным и расчетным радиальным скоростям движения внешних стенок в тестах по взрыву цилиндрических образцов. В открытой литературе имеются также работы по калибровке моделей кинетики горения взрывчатых веществ [4, 5, 7, 10–12]. Однако в этом случае удобно использовать временные профили давления, которые в экспериментах снимаются с использованием специальных датчиков, помещенных внутри исследуемого образца. Математическая постановка задачи оптимизации при этом остается неизменной, в формуле (1) достаточно заменить скорость на давление.

В данной работе основное внимание уделяется калибровке материальных моделей, однако алгоритм, приведенный на рисунке 1, может быть использован в том числе и в задаче оптимизации инженерных конструкций. Для общности изложения следует указать, что такие работы проводились: например, в работах [3, 8] выполнялась оптимизация конструкций зарядов, формирующих кумулятивные струи и ударные ядра. В частном случае кумулятивных зарядов требуется максимизировать импульс струи, который и будет задавать вид целевой функции. Вектор искомых параметров \vec{X} представляет собой набор параметров, определяющих геометрию заряда.

Для гидродинамической расчетной части задачи оптимизации был использован код, основанный на методе сглаженных частиц SPH, использующий решение задачи Римана на контакте между парами SPH-частиц [16, 17]. Чтобы снизить вычислительные затраты на гидродинамические расчеты, проводилось моделирование в одномерной постановке. В случае моделирования тестов по взрыву цилиндрических образцов также удобно использовать одномерную постановку в полярных координатах.

3. МАШИННОЕ ОБУЧЕНИЕ МОДЕЛИ УПРУГОПЛАСТИЧНОСТИ

Для многих инженерных задач, связанных с ударным импульсным воздействием на твердотельные металлические образцы, необходимо правильно воспроизводить упругопластическое поведение материалов. На сегодняшний день разработано множество феноменологических моделей, наиболее простой из которых является модель идеального упруго-пластического тела с постоянным пределом текучести. Более сложные модели могут учитывать эффект упрочнения металлов в результате пластического течения, влияние скорости деформации, а также термодинамического состояния на предел текучести. Не вдаваясь в детали различных моделей, рассмотрим наиболее часто используемую в инженерных приложениях прочностную модель Джонсона–Кука [18, 19]. Согласно этой модели, предел текучести можно выразить в виде следующей функциональной зависимости:

$$\sigma_Y = (A + B\epsilon_{pl}^N) \left(1 + C \ln \frac{\dot{\epsilon}}{\dot{\epsilon}_0}\right) \left(1 - \left(\frac{T - T_r}{T_m - T_r}\right)^M\right) + DP, \quad (2)$$

где ϵ_{pl} — величина пластических деформаций, $\dot{\epsilon}$ — скорость деформации, T — температура (T_r — референсная температура, как правило, равная комнатной; T_m — температура плавления), P — давление; параметры A , B , C , D , N , M — константы модели. В рамках модели Джонсона–Кука часть констант имеет физический смысл, и их оценку можно получить по результатам отдельных экспериментов. Такую оценку можно использовать в качестве нулевого приближения при решении задачи оптимизации.

Здесь для простоты будем полагать, что предел текучести не зависит от термодинамического состояния, что соответствует нулевым значениям констант D и M . Таким образом, мы ограничимся только двумя первыми слагаемыми в формуле (2). В этом смысле вектор искомых параметров \vec{X} определяется константами A , B , C и N , т.е. $\vec{X} = \{A, B, C, N\}$. В качестве примера рассмотрим алюминий марки 2139-T8 [20], механические свойства которого приведены в таблице 1. Подборка констант модели Джонсона–Кука для алюминия проводилась по восьми ударно-волновым экспериментам, в которых два образца из алюминия соударялись со скоростью от ~ 160 до ~ 1200 м/с. Продольный размер образцов при этом во всех экспериментах брался одинаковым: длина ударника составляла ~ 3 мм, длина мишени — ~ 6 мм. Задняя граница мишени была соединена с подложкой из фторида лития.

Таблица 1. Механические свойства алюминия. ρ_0 — начальная плотность, G — модуль сдвига, E — модуль Юнга, C_0 — скорость звука, s_a — параметр ударной адибаты вида $u_s = C_0 + s_a u_p$, где u_s — скорость ударной волны, u_p — скорость вещества, A , B , C , D , M , N — параметры модели Джонсона–Кука. Использовались следующие методы оптимизации из библиотеки [21]: `brute/dual annealing/Nelder-Mead/Powell`.

Параметры	Al [20]	Al(расчет)
ρ_0 , кг/м ³	2795 ± 2	2795
G , ГПа	27.2 ± 0.5	27
E , ГПа	73.1 ± 1.4	-
C_0 , км/с	5.26 ± 0.05	5.327
s_a	1.29	1.289
A , ГПа	0.43	0.498/0.415/0.475/0.473
B , ГПа	0.65	0.302/0.380/0.058/0.536
C	0	0.014/0.080/0.005/0.005
D	0	0
M	1	0
N	0	0

В таблице 1 приведены константы модели, взятые из работы [20] (центральная колонка), а также константы, полученные в результате решения задачи оптимизации (правая колонка). Полученные расчетные данные представлены для различных методов оптимизации (апробировались 4 различные модели).

На рисунке 2(а) представлено сравнение профилей скорости, полученных в гидродинамических расчетах с использованием констант модели Джонсона–Кука, подобранных путем решения задачи оптимизации, с экспериментальными профилями. В целом, получено хорошее согласие расчетных профилей с экспериментальными данными по всему набору экспериментов. На графике 2(б) представлено сравнение профилей скорости для двух наборов констант модели пластичности, полученных в результате решения задачи оптимизации двумя различными симплектическими методами [21]. Оба метода дают приблизительно одинаковые профили скорости, которые с хорошей точностью воспроизводят результаты эксперимента. Стоит, однако, отметить, что метод Powell [22] дает несколько более плавный переход от упругого предвестника к пластической волне, в сравнении с симплектическим методом Nelder–Mead [23], что лучше воспроизводит экспериментальный профиль. За переход между упругой и пластическими волнами отвечают константы модели B (константа, отвечающая за эффект упрочнения в результате возникновения пластических деформаций) и C (константа, отвечающая за влияние скорости деформации). Согласно результатам, полученным с использованием метода Powell, константа модели B будет больше, чем при использовании метода Nelder–Mead, что и приводит к более плавному переходу.

Из таблицы 1 можно отметить, что все апробированные модели оптимизации дают приблизительно одинаковые значения константы A , при этом наблюдается большой разброс по значениям констант B и C . Дело в том, что в рамках модели Джонсона–Кука оба чле-

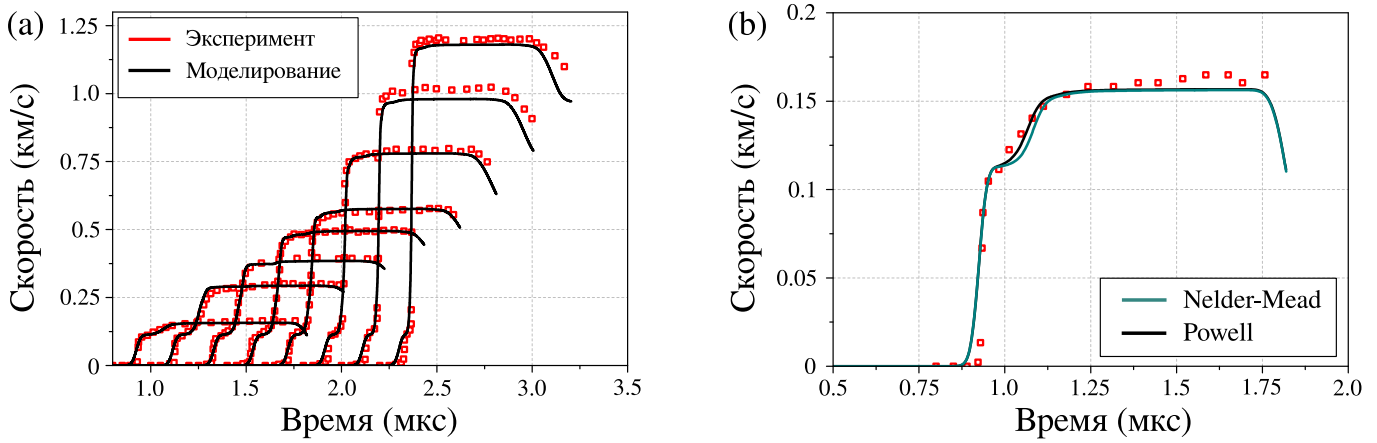


Рисунок 2. (а) Сравнение профилей скорости, полученных в гидродинамических расчетах с оптимизированными с помощью метода Powell константами модели Джонсона–Кука (черные линии), с экспериментальными профилями (красные маркеры). (б) Расчетные профили скорости для эксперимента с наименьшей амплитудой из представленных на рисунке (а) с константами моделей, полученными с использованием различных методов оптимизации.

на, содержащих константы B и C , сильно коррелируют, т.к. рост скорости деформации всегда сопровождается ростом пластических деформаций (в рамках единого ударно-волнового эксперимента). Поэтому, используя только ударно-волновые эксперименты, невозможно получить единственное оптимальное значение констант B и C : увеличение параметра B может компенсироваться увеличением параметра C , и наоборот. Таким образом, для подбора констант модели упруго-пластичности, необходимы дополнительные эксперименты, отличные от ударно-волновых. Такими экспериментами могут служить статические эксперименты по растяжению металлических стержней, в которых влияние скорости деформации нивелируется.

Помимо симплектических методов были апробированы также методы глобальной оптимизации: метод перебора (brute force), отжига (dual annealing) и др. Они дают результаты, аналогичные симплектическим методам, однако для рассмотренной задачи методы глобальной оптимизации (это касается, в первую очередь, метода грубой силы) требуют гораздо большего количества итераций для сходимости.

4. МАШИННОЕ ОБУЧЕНИЕ МОДЕЛИ РАЗРУШЕНИЯ КЕРАМИК

Еще одним классом материальных моделей, часто используемых в инженерных расчетах, являются модели разрушения. Подобно моделям упруго-пластичности, они также производят корректировку тензора напряжений в соответствии с некоторым критерием (как правило, критерием Мизеса [24]), однако в отличие от выше рассмотренных моделей упруго-пластичности модели разрушения учитывают предысторию процесса нагружения. Одним из примеров таких моделей могут служить модели разрушения керамических материалов [25–28]. В этой главе за основу для исследования возьмем модифицированную модель Джонсона–Холмквиста–Бесселя (JHB) [28].

Основная идея этой модели состоит в том, что для материала в неразрушенном состоянии существует определенный предел прочности σ_i , ниже которого его поведение под воздействием ударной нагрузки можно

считать упругим. При достижении этого предела инициируется процесс разрушения, характеризующийся постепенной потерей прочности. При этом снижение прочности в предложенной модели лимитируется снизу величиной $\sigma_f < \sigma_i$, которая определяет прочность материала в полностью разрушенном состоянии. Переход материала под воздействием ударного нагружения от неразрушенного состояния к полностью разрушенному осуществляется путем введения модельного параметра D , изменяющегося в диапазоне от 0 до 1 и определяющего кинетику разрушения. Подробное описание модифицированной модели JHB, а также пошаговый алгоритм ее реализации приведены в работе [28].

Модель является многопараметрической: из таблицы 2 можно видеть, что общее количество параметров порядка десяти. Не вдаваясь в детали, будем проводить оптимизацию только по трем из них $\{\sigma_i^{\max}, \sigma_f^{\max}, \beta\}$, поскольку, как показал предыдущий опыт исследования данной модели, чувствительность модели к изменению этих констант наиболее заметна. В качестве исследуемого материала рассмотрим карбид кремния. Аналогично модели упруго-пластичности, оптимизацию параметров модели разрушения будем проводить по ударно-волновым экспериментам, результаты которых представлены в работе [29]. В этих экспериментах ударник из карбида кремния или другого материала с хорошо известными механическими параметрами разгоняется с использованием газовой пушки до скоростей 0.6–6.5 км/с. В качестве ударника в рассмотренных экспериментах использовались карбид кремния (SiC), фторид лития (LiF), тантал (Ta), пластик (TPX), медь (Cu). В работе [29] проводились также эксперименты с догрузкой, в которых ударник представляет собой склеенные друг с другом образцы из мягкого и жесткого материалов. Геометрические размеры ударника и мишени также изменялись от эксперимента к эксперименту. В качестве мишени рассматривались образцы из нескольких типов карбида кремния, технология производства, а также микроскопическая структура которых несколько отличаются. Механические свойства карбида кремния (плотность, модули сжатия, сдвига и т.д.), использованные в расчетах, задавались одинаковыми для всех типов карбида кремния, они приведены в таблице 2.

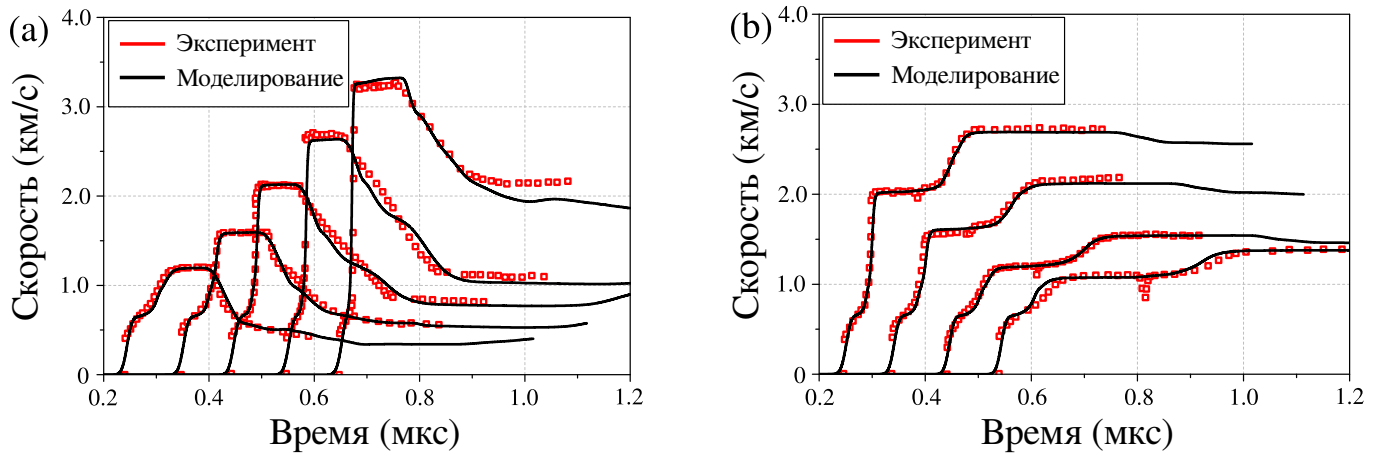


Рисунок 3. (а) Профили скорости в ударно-волновых экспериментах с разгрузкой, (б) профили скорости в ударно-волновых экспериментах с догрузкой. Черные кривые — расчетные профили, красные маркеры — результаты экспериментов.

Таблица 2. Модельные параметры SiC, AlN и B₄C. Здесь ρ_0 — нормальная плотность, G — модуль сдвига, C_0 — скорость звука, $\sigma_i^0, \sigma_i^{\max}, P_i$ — параметры кривой неразрушенного материала, $\sigma_f^0, \sigma_f^{\max}, P_f$ — параметры кривой разрушенного материала, T — откольная прочность, C — коэффициент упрочнения, K_1 — модуль объемного сжатия, K_2 и K_3 — вспомогательные модули, P_{PT}^{12} — давление прямого фазового перехода, P_{PT}^{21} — давление обратного фазового перехода, $\mu_{12} = \rho_{12}/\rho_0 - 1$ — объемная деформация фазового перехода.

Параметры	SiC	AlN	B ₄ C
ρ_0 , кг/м ³	3150	3250	2550
G , ГПа	182.9	130.0	216.0
C_0 , км/с	8.48	7.87	10.0
σ_i^0 , ГПа	4.92	2.1	10.0
σ_i^{\max} , ГПа	13.89/13.83	5.22	14.76
P_i , ГПа	1.5	0.5	6.0
σ_f^0 , ГПа	4.95/4.865	1.5	4.065
σ_f^{\max} , ГПа	9.9/9.73	3.0	8.13
P_f , ГПа	3.0	1.5	6.0
T , ГПа	0.75	0.45	0.27
C	0.009	0.013	0.01
β	0.98/0.98	1.0	0.38
K_1 , ГПа	226.5	201.5	-
K_2 , ГПа	361.0	260.0	-
K_3 , ГПа	0.0	0.0	-
P_{PT}^{12} , ГПа	100.0	19.0	-
P_{PT}^{21} , ГПа	35.0	0.0	-
μ_{12}	0.2	0.218	-

На рисунке 3 представлено сравнение профилей скорости, полученных в расчетах с оптимальными параметрами модели (черные кривые) и в экспериментах (красные маркеры). Левый график на рисунке 3 демонстрирует результаты расчета экспериментов с разгрузкой, правый график — результаты моделирования ударно-волновых экспериментов с догрузкой. В целом, получено очень хорошее совпадение

результатов моделирования с экспериментальными данными.

Как и в случае с моделью Джонсона–Кука, описанной выше, для оптимизации констант модели ЖНВ апробировались различные методы оптимизации. Однако в рассматриваемом случае значение оптимальных параметров, полученных с использованием различных подходов с хорошей точностью совпадают, см. таблицу 2, что неудивительно, поскольку все аргументы задачи оптимизации можно считать независимыми [25–28]. Таким образом, следует отметить, что для оптимизации констант модели разрушения керамик ЖНВ достаточно результатов ударно-волновых экспериментов, указанных выше.

5. МАШИННОЕ ОБУЧЕНИЕ МОДЕЛИ ОТКОЛА

В большинстве инженерных задач, связанных с ударно-волновым воздействием ключевую роль играет также процесс откола, который происходит в результате возникновения больших растягивающих напряжений внутри материала. Традиционно откольное разрушение рассматривается в твердых телах. Однако в случае сверхвысоких ударных нагрузок сильное сжатие материала может приводить к сильному нагреву материала и, как следствие, к изменению его фазового состояния, расплавлению. Откол в жидких материалах принято называть кавитацией, однако вне зависимости от агрегатного состояния природа этих явлений одинакова.

В последние несколько десятилетий процесс динамического откола в твердых материалах исследовался достаточно широко как экспериментально [30–35], так и теоретически [30, 36–43]. При этом, как правило, для исследования откола, как и в предыдущих случаях, используются ударно-волновые эксперименты (нередко в качестве нагружения используется также детонационная волна от взрывчатого вещества). Здесь, в отличие от моделей пластичности и разрушения, рассмотренных выше, ключевую роль при анализе модели откола играет волна разгрузки, в частности, характер снижения скорости до момента первой регистрации откольного импульса, доходящего до задней границы мишени.

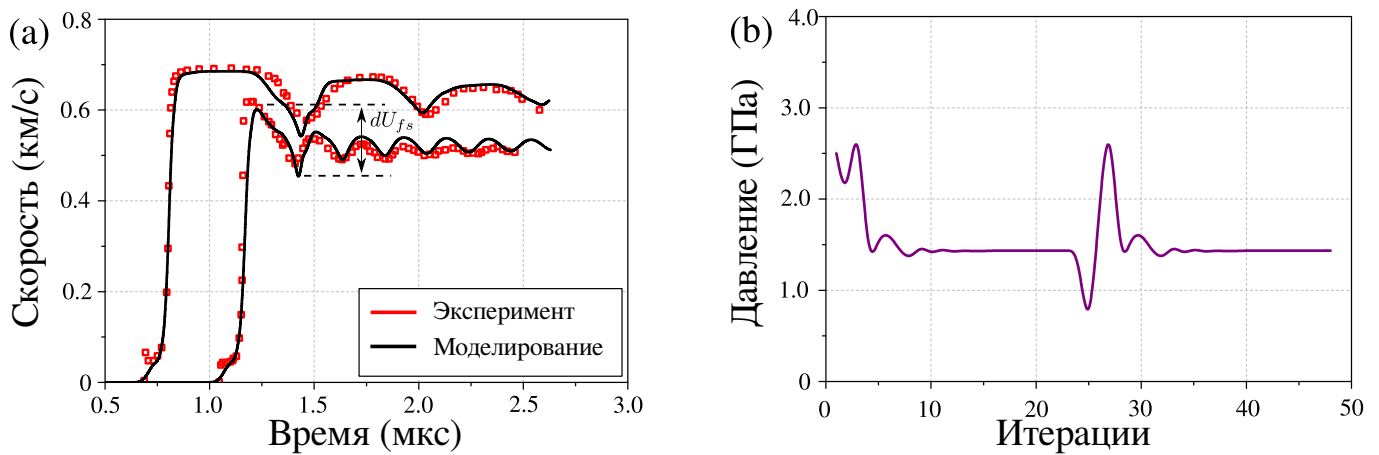


Рисунок 4. (а) Профили скорости на свободной границе мишени в ударно-волновых экспериментах: черные кривые относятся к результатам моделирования, красные маркеры — к экспериментальным данным. (б) Сходимость оптимизационной задачи на поиск откольной прочности алюминия методом Powell.

Причем наиболее информативным является скачок скорости в первичной волне разгрузки, обозначенный dU_{fs} на рисунке 4 (для деталей см. работу [30]).

В общем случае откольная прочность материала может зависеть от термодинамического состояния вещества, его микроструктуры, динамики нагружения и т.д. Однако для иллюстрации метода оптимизации, применительно к откольным процессам, ниже рассмотрена наиболее простая модель, в которой откольная прочность является постоянной величиной, а сам процесс откола не является динамическим (т.е. не зависит от кинетики — зарождения пор, их роста и коагуляции) и происходит мгновенно. В качестве тестировочного набора для определения откольной прочности использованы два ударно-волновых эксперимента по соударению образцов из алюминия. В экспериментах варьировался продольный размер ударника, а также скорость соударения. Механические параметры для алюминия, которые использованы в расчетах, близки к тем, что представлены в таблице 1.

На рисунке 4(а) представлены профили скорости, полученные в расчетах с оптимизированной откольной прочностью алюминия (черные кривые), и их сравнение с экспериментальными профилями (красные маркеры). Видно, что получено достаточно хорошее совпадение с экспериментом как по профилям, в целом, так и по скачку скорости dU_{fs} в первичной волне разгрузки, в частности, что должно указывать на правильное воспроизведение откольной прочности алюминия. Согласно проведенным расчетам откольная прочность алюминия в рассмотренных экспериментах составляет 1.43 ГПа.

6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе представлен общий алгоритм определения материальных констант на основании прямого численного моделирования ударно-волновых экспериментов. За счет оптимизации параметров модели с помощью серии гидродинамических расчетов можно добиться высокой точности согласия экспериментальных и расчетных данных. Для относительно простых материалов такие модели (как правило феноменологические) определяются небольшим количеством независимых па-

раметров, и такой подход при качественной калибровке демонстрирует, в целом, очень хорошие результаты.

Показано, что машинное обучение параметров модели Джонсона–Кука позволяет достоверно описать упругий предвестник в ряде экспериментов с алюминием. Аналогичный подход для керамики позволяет достоверно воспроизвести фронт упругой волны и волны разрушения. Кроме того, показано, что калибровка откольной прочности также может быть произведена с помощью представленного алгоритма.

Для ряда более сложных материалов количество параметров, определяющих их поведение при интенсивных динамических нагрузках, может быть очень большим (более того, эти параметры могут быть связаны нелинейно), и поэтому с фундаментальной точки зрения сложность реализации модели на текущий момент времени может быть непреодолима. При этом упрощения, которые, как правило, делаются при разработке феноменологических моделей могут не давать приемлемой для инженерных расчетов точности. К таким более комплексным моделям можно отнести модели композитных материалов, геологических пород, сложных промышленных сплавов и многое другое. Имеются основания полагать, что для повышения точности расчетов феноменологические модели материалов можно заменить искусственными нейросетями, обученными на некотором наборе данных, экспериментальном и/или расчетном, поскольку нейронные сети обладают для этого достаточной гибкостью.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Karniadakis G E, Kevrekidis I G, Lu L, Perdikaris P, Wang S and Yang L 2021 *Nature Reviews Physics* **3** 422–440
2. Fortov V E 2009 *Physics Uspekhi* **52** 615–647
3. Baker E L 1992 *Modeling and optimization of shaped charge liner collapse and jet formation* Ph.D. thesis Washington State University
4. Baker E, Schimmel B and Grantham W 1996 Numerical optimization of ignition and growth reactive flow modeling for pax2a *AIP Conference Proceedings* vol 370 pp 409–412
5. Murphy M, Simpson R, Urtiew P, Souers P, Garcia F and Garza R 1996 Reactive flow model development for pbxw-126 using modern nonlinear optimization methods *AIP*

- Conference Proceedings* vol 370 pp 417–420
6. Murphy M J 1996 Utility of coupling nonlinear optimization methods with numerical modeling software *Preprint* (Lawrence Livermore National Lab., CA (United States))
 7. Schimel B D, Baker E L and Grantham W J 1997 *Journal of Energetic Materials* **15** 289–311
 8. Gardner D R and Vaughan C T 1999 The optimization of a shaped-charge design using parallel computers *Preprint* (Sandia National Labs., Albuquerque, NM (US); Sandia National Labs...)
 9. Amarchinta H K, Grandhi R V, Clauer A H, Langer K and Stargel D S 2010 *Journal of Materials Processing Technology* **210** 1997–2006
 10. Baranda Ribeiro J, Mendes R and Silva C 2010 *Propellants, Explosives, Pyrotechnics* **35** 292–299
 11. Walls K, Littlefield D, Dorgan R and Lambert D 2013 *Procedia Engineering* **58** 279–288
 12. Gambino J R, Tarver C M and Springer H K 2018 *Journal of Applied Physics* **124** 195901
 13. Kapila A K, Schwendeman D W, Bdzil J B and Henshaw W D 2007 *Combustion Theory and Modelling* **11** 781–822
 14. Ahrens T J, Gust W and Royce E 1968 *Journal of Applied Physics* **39** 4610–4616
 15. Barker L and Hollenbach R 1972 *Journal of Applied Physics* **43** 4669–4675
 16. Parshikov A N and Medin S A 2002 *Journal of Computational Physics* **180** 358 – 382
 17. Egorova M S, Dyachkov S A, Parshikov A N and Zhakhovsky V V 2019 *Computer Physics Communications* **234** 112–125
 18. Johnson G R and Cook W H 1983 *Proceedings of the seventh international simposium on ballistics, Hague, Netherlands* 541–547
 19. Johnson G R and Cook W H 1985 *Engineering Fracture Mechanics* **21** 31–48
 20. Casem D T and Dandekar D P 2012 *Journal of Applied Physics* **111** 063508
 21. SciPy <https://scipy.org>
 22. Powell M J D 1964 *The Computer Journal* **7** 155–162
 23. Nelder J A and Mead R 1965 *The Computer Journal* **7** 308–313
 24. von Mises R 1913 *Mathematisch-Physikalische Klasse* **1** 582–592
 25. Johnson G R and Holmquist T J 1999 *Journal of Applied Physics* **85** 8060–8073
 26. Johnson G R, Holmquist T J and Beissel S R 2003 *Journal of applied physics* **94** 1639–1646
 27. Holmquist T J and Johnson G R 2005 *Journal of applied physics* **97** 093502
 28. Dyachkov S, Parshikov A, Egorova M, Grigoryev S Y, Zhakhovsky V and Medin S 2017 *Journal of Applied Physics* **124** 085902
 29. Vogler T, Reinhart W, Chhabildas L and Dandekar D 2006 *Journal of applied physics* **99** 023512
 30. Antoun T 2003 *Spall fracture* (Springer Science & Business Media)
 31. Chen X, Asay J, Dwivedi S and Field D 2006 *Journal of applied physics* **99** 023528
 32. Holtkamp D, Clark D, Ferm E, Gallegos R, Hammon D, Hemsing W, Hogan G, Holmes V, King N, Liljestr and R *et al* 2004 A survey of high explosive-induced damage and spall in selected metals using proton radiography *AIP Conference Proceedings* vol 706 pp 477–482
 33. De Ress equier T, Signor L, Dragon A, Boustie M, Roy G and Llorca F 2007 *Journal of applied physics* **101** 013506
 34. De Resseguier T, Signor L, Dragon A and Roy G 2010 *International Journal of Fracture* **163** 109–119
 35. Signor L, de Ress equier T, Dragon A, Roy G, Fanget A and Faessel M 2010 *International Journal of Impact Engineering* **37** 887–900
 36. Grady D 1988 *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* **36** 353–384
 37. Dongare A M, Rajendran A M, LaMattina B, Zikry M A and Brenner D W 2009 *Physical Review B* **80** 104108
 38. Dongare A M, Rajendran A M, LaMattina B, Zikry M A and Brenner D W 2010 *Journal of Applied Physics* **108** 113518
 39. Luo S N, An Q, Germann T C and Han L B 2009 *Journal of Applied Physics* **106** 013502
 40. Luo S N, Germann T C and Tonks D L 2009 *Journal of Applied Physics* **106** 123518
 41. Kuksin A Y, Norman G, Pisarev V, Stegailov V and Yanilkin A 2010 *Physical Review B* **82** 174101
 42. Xiang M, Hu H and Chen J 2013 *Journal of Applied Physics* **113** 144312
 43. Cai Y, Wu H and Luo S 2017 *Journal of Applied Physics* **121** 105901