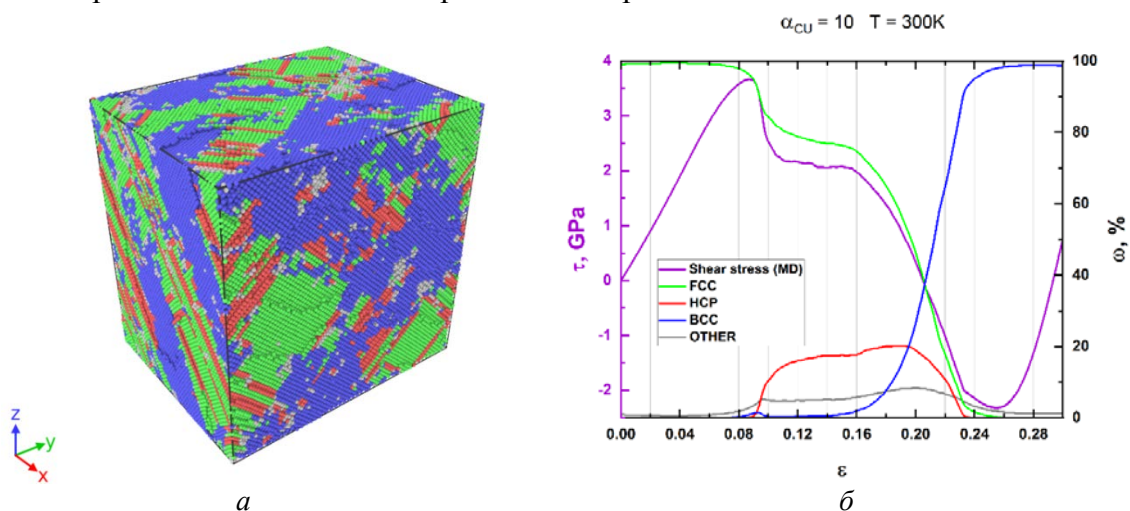


## ПРИМЕНЕНИЕ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ В ИССЛЕДОВАНИИ ФАЗОВЫХ ПРЕВРАЩЕНИЙ Al–Cu СПЛАВОВ ПРИ ДЕФОРМИРОВАНИИ

Грачёва Н.А., Фомин Е.В., Майер А.Е.

Челябинский государственный университет, Челябинск, Россия  
[nagra45da@gmail.com](mailto:nagra45da@gmail.com)

Одним из актуальных научных направлений является исследование деформации в сплавах при динамическом нагружении и связанные с этим изменения их микроструктуры. В данной работе мы изучаем деформационное поведение Al–Cu сплава и чистых металлов при одноосном сжатии в широком диапазоне температур. Моделирование проводится с помощью программного пакета LAMMPS [1]. При одноосном сжатии кристалла из Al–Cu сплава наблюдается фазовое превращение из ГЦК в ОЦК решетку. Перестроение кристаллической структуры ведет к релаксации касательных напряжений (Рис.1). На основе данных моделирования сформулирована модель фазового перехода, учитывающая эволюцию фазового состава и вызванную ей релаксацию напряжений. Параметры модели подбираются с помощью вероятностного метода Байеса, являющегося одним из подходов машинного обучения. Метод байесовской идентификации параметров применяется и для определения коэффициентов модели дислокационной пластичности металлов [2,3]. Другое применение методов машинного обучения заключается в использовании искусственных нейронных сетей (ИНС) в качестве уравнения состояния. Были обучены две ИНС с прямой связью, позволяющие определять константы упругости и рассчитывать давление в образцах. ИНС обучены на данных, полученных с помощью метода молекулярной динамики. Моделировались процессы как одноосного, так и гидростатического сжатия и растяжения кристаллов.



**Рис. 1.** МД система для сплава с 10% содержанием атомов меди в алюминии при деформации 0,21 (а); эволюция касательных напряжений и объемной доли фаз (б)

*Работа выполнена за счёт гранта РНФ (проект № 20-11-20153).*

1. Plimpton S. Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics // J. Comput. Phys. 1995. V. 117. P. 1–19.
2. Evolution of shock compression pulses in polymethacrylate and aluminum / T.V. Popova, A.E. Mayer, K.V. Khishchenko // J. Appl. Phys. – 2018. – V. 123, 235902.
3. Dynamics of growth and collapse of nanopores in copper / F.T. Latypov, A.E. Mayer, V.S. Krasnikov // Int. J. Solids Struct. – 2020. – V. 202, P. 418-433.