

DOI: [10.7242/1999-6691/2018.11.1.5](https://doi.org/10.7242/1999-6691/2018.11.1.5)

УДК: 539.5, 519.6

МЕТОДЫ ОЦЕНКИ ТОЧНОСТИ И УСТОЙЧИВОСТИ АЛГОРИТМА ОПРЕДЕЛЕНИЯ ЗНАЧЕНИЙ ПАРАМЕТРОВ МОДЕЛЕЙ СВЕРХПЛАСТИЧНОСТИ

И.А. Гончаров, Т.А. Белякова

Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, Москва, Российская Федерация

В работе обсуждаются вопросы определения значений параметров, входящих в системы уравнений, описывающих сверхпластическое деформирование материалов. Проведена классификация этих систем уравнений и необходимых наборов экспериментальных данных. Обсуждаются вычислительные особенности ряда существующих моделей сверхпластического деформирования и связанные с ними проблемы аппроксимационных алгоритмов. Приведены рекомендации, позволяющие строить более универсальные алгоритмы отыскания значений материальных констант. Предложена схема алгоритма аппроксимации параметров с помощью метода наименьших квадратов применительно к конкретным задачам сверхпластичности с учётом их специфики. Рассматриваемый алгоритм в достаточной степени универсален, адаптивен к различным феноменологическим моделям. Одним из ключевых результатов работы является введение метрик для оценки либо погрешности, с которой выбранная феноменологическая модель способна воспроизвести экспериментальные данные, либо расхождения результатов, полученных по различным моделям. В терминах введённых метрик сформулирована методика проверки предсказательной силы феноменологических моделей с материальными константами, получаемыми с помощью того или иного аппроксимационного алгоритма, а также устойчивости алгоритма к погрешностям экспериментальных данных при нахождении значений параметров конкретной системы уравнений. С помощью принятых для оценки погрешности метрик проведено сравнение моделей, построенных на основе разных определяющих соотношений и уравнений эволюции микроструктуры. Показано, что предложенный алгоритм устойчив к погрешностям, и феноменологические модели с найденными при его использовании параметрами обладают предсказательной силой. Проанализировано влияние выбора совокупности кривых и способа оцифровки исходных данных на достигнутую погрешность. Показано, что предложенные метрики позволяют вычислить меру способности выбранной системы уравнений описывать конкретные экспериментальные данные.

Ключевые слова: сверхпластичность, определяющие соотношения, феноменологические модели, эволюция микроструктуры, параметры модели, идентификация параметров, аппроксимационные алгоритмы, устойчивость алгоритма

THE METHODS OF ESTIMATING THE ACCURACY AND STABILITY OF THE ALGORITHM FOR DETERMINATION OF VALUES OF THE PARAMETERS IN SUPERPLASTICITY MODELS

I.A. Goncharov, T.A. Belyakova

Lomonosov Moscow State University, Moscow, Russian Federation

The problem of determination of the parameters values in systems of equations, describing the superplastic deformation of materials, is considered in the paper. The classifications are carried out for systems of phenomenological equations and for the sets of experimental data commonly used in superplastic applications. We discuss typical computational features of superplasticity models and the connected problems of the approximation algorithms. Some approaches are proposed to produce more universal algorithms for determination of values for the material constants. The scheme of the algorithm for the parameters approximation as applied to the superplasticity problems, based on the least-squares technique, is suggested. The algorithm proposed is general enough, extensible and applicable to different phenomenological models. One of the main results of the paper is the introduction of the metrics for the estimation of the accuracy of reproducing the experimental data with the phenomenological model under consideration (or of the divergence for the results obtained on the base of different models). In terms of the introduced metrics, the methodology is formulated for the verification of the predictive power of the phenomenological models with the material constants determined on the base of some approximation algorithm. This technique can also be applied for the estimation of the stability of the approximation algorithm in the random errors in the experimental data when some determined phenomenological model is used. On the base of the proposed metrics for the estimation of the accuracy two models, included different constitutive relations and microstructure evolution equations are compared. It is shown that the proposed algorithm is stable, and the phenomenological models with the parameter obtained by use of this algorithm can predict correctly the superplastic behaviour beyond the area of the experimental data in use. The influence of the selection of the set of experimental curves and of the digitization pattern of data on the approximation error is described. It is shown that the capacity of the phenomenological model to reproduce the specific set of experimental data also can be estimated with the help of the metrics proposed.

Keywords: superplasticity, constitutive equations, phenomenological models, microstructure evolution, model parameters, parameters identification, approximation algorithms, algorithm stability

1. Введение и цели исследования

Способность поликристаллических материалов при определённых температурно-скоростных условиях испытания проявлять аномально высокое удлинение — в сотни и даже тысячи процентов — при относительно низких напряжениях течения принято называть сверхпластичностью [1, 2]. Однако эти условия достаточно расплывчаты, поэтому невозможно точно сказать, когда процесс деформирования материала становится сверхпластическим и в какой момент перестает быть таковым [3]. Так, считается, что для металлов необходимы температура порядка $0,4T_m$ (T_m — температура плавления), скорость

деформации в пределах $10^{-5} \dots 10^{-2} \text{ с}^{-1}$ и при этом материал должен обладать микроструктурой со средним размером зерна не более 10 мкм. Для керамик допустимый размер зёрен существенно ниже, порядка 1 мкм [2]. Материаловеды тратят большие усилия на создание исходных материалов с как можно меньшим размером зерна. В некоторых случаях речь идёт о десятках нанометров, например в так называемой ультра-мелкозернистой (УМЗ) структуре [4].

Наиболее часто встречающимся видом эксперимента в условиях сверхпластического деформирования является одноосное растяжение образцов при постоянной скорости деформации. Наблюдаемые в этих экспериментах зависимости напряжения течения σ от скорости пластических деформаций $\dot{\epsilon}_p$ исторически служили основой для построения определяющих соотношений сверхпластичности в одномерном случае. Однако их обобщение на трёхмерное напряжённое состояние остается одним из наиболее сложных вопросов в теории сверхпластичности. Некоторыми авторами предлагаются зависимости вида [5]:

$$D_{ij}^p = (3S_{ij}/2\sigma_e) \dot{p},$$

$$\overset{\nabla}{\sigma}_{ij} = G D_{ij}^e + 2\lambda D_{kk}^e,$$

где $\sigma = \sqrt{(3/2)S_{ij}S_{ij}}$ — интенсивность касательных напряжений, $S_{ij} = \sigma_{ij} - \sigma_m \delta_{ij}$, $\sigma_m = (1/3)\sigma_{kl}\delta_{kl}$ — девиатор тензора напряжений Коши и среднее напряжение, \dot{p} — интенсивность скоростей пластических деформаций, D_{ij}^p — скорость пластических деформаций, D_{ij}^e — скорость упругих деформаций, $\overset{\nabla}{\sigma}_{ij}$ — производная Яуманна тензора напряжений Коши, G и λ — упругие постоянные. Авторам работы [5] удалось при помощи подобных соотношений получить удовлетворительные результаты расчёта на основе метода конечных элементов. Для интенсивности скоростей пластических деформаций \dot{p} обычно предлагаются инвариантные соотношения вида $\dot{p} = \dot{p}(\sigma_e, \chi_i)$, где χ_i — параметры модели (материальные постоянные) и внутренние переменные состояния материала. Именно эта зависимость в случае одноосного растяжения (при $\sigma_e = \sigma$ и $\dot{p} = \dot{\epsilon}_p$ в предположении несжимаемости) описывает наблюдаемые экспериментальные диаграммы. В дальнейшем именно различные виды соотношения $\dot{\epsilon}_p = \dot{\epsilon}_p(\sigma, \chi_i)$ будут использоваться в настоящей работе. Основой для определения параметров этого соотношения при заданной форме зависимости служат данные экспериментов на одноосное растяжение и, при необходимости, дополнительные экспериментальные данные.

В зависимости от внутренней структуры материала внешние механические и тепловые воздействия приводят к конкретному напряжённо-деформированному состоянию. Макроскопическое представление внутреннего микроструктурного состояния материала и его зависимость от истории деформирования может осуществляться в духе подхода Ю.Н. Работнова [6] с конечным числом тензорных и скалярных величин, называемых внутренними переменными состояния системы. Изменение внутренних переменных состояния задаётся при помощи уравнений, называемых эволюционными. С вычислительной точки зрения удобно классифицировать определяющие соотношения по набору внутренних переменных. Математически это соответствует размерности системы дифференциальных уравнений, образующих модель.

Простейшим случаем является отсутствие у модели внутренних переменных. Это соответствует определяющим соотношениям в форме $\dot{\epsilon}_p = \dot{\epsilon}_p(\sigma, \chi_i)$ либо $\sigma = \sigma(\dot{\epsilon}_p, \chi_i)$, где χ_i включают в себя только материальные постоянные и величины, считающиеся неизменными на всём протяжении процесса деформирования (например, температура в изотермическом процессе). Единственный плюс такой модели — это простота и скорость расчёта; недостаток же состоит в том, что она не описывает, в частности, рост зёрен или упрочнение в процессе с постоянной скоростью деформации.

Улучшает данную модель введение в рассмотрение внутренних переменных и эволюционных уравнений для них. Это могут быть переменные, характеризующие микроструктурное состояние материала (в простейшем случае — один скалярный параметр d , связанный со средним размером зерна); некоторые авторы [4] используют параметр порообразования и другие величины. Таким же образом может приниматься во внимание изменение температуры T . Так, например, определяющие соотношения в форме

$$\begin{cases} \dot{\epsilon}_p = \dot{\epsilon}_p(\sigma, d, \chi_i) \text{ либо } \sigma = \sigma(\dot{\epsilon}_p, d, \chi_i), \\ \dot{d} = \dot{d}(\sigma, \dot{\epsilon}_p, d, \chi_i) \end{cases}$$

способны описывать рост зёрен. В них возможно включение функции распределения объёмной доли зёрен фиксированного размера $V(d)$ и отслеживание изменений этой функции, связанных с ростом зёрен и

соответствующим перераспределением объёмных долей. Кроме того, такие уравнения способны частично учитывать упрочнение (ту его часть, которая вызвана ростом зёрен).

Для более точного моделирования начального участка диаграммы деформирования в определяющие соотношения дополнительно могут быть явно включены время t и/или интенсивность накопленной к данному моменту сверхпластической деформации ε_p :

$$\begin{cases} \dot{\varepsilon}_p = \dot{\varepsilon}_p(\sigma, \varepsilon_p, d, \chi_i) \text{ либо } \sigma = \sigma(\dot{\varepsilon}_p, \varepsilon_p, d, \chi_i), \\ \dot{d} = \dot{d}(\sigma, \dot{\varepsilon}_p, \varepsilon_p, d, \chi_i). \end{cases} \quad (1)$$

Именно этот класс определяющих соотношений представляет интерес для авторов настоящей работы. Далее будут приведены известные уравнения сверхпластичности, которые записываются (или могут быть записаны) в форме (1), и предложена методика их исследования, включающая: универсальный (в рамках данного класса) алгоритм нахождения оптимальных значений входящих в уравнения параметров; метрики для оценки применимости модели и сравнения моделей между собой; подходы к анализу свойств получаемых моделей, в частности, их устойчивости к погрешностям экспериментальных данных.

2. Исследуемые модели сверхпластичности и виды экспериментов

Исторически многие определяющие соотношения для случая одноосного нагружения формулировались на основе анализа микроструктурных механизмов, обеспечивающих сверхпластическое деформирование: диффузионной ползучести, зерно-граничного проскальзывания, внутризёрненного (дислокационного) скольжения [7]. Для достижения больших значений деформации без образования концентраторов необходим режим совместного действия этих процессов, при котором неоднородности структуры (такие как вакансии атомной решётки), возникающие при деформировании по одному механизму, поглощаются (заращаются) при другом. Например, из литературы достаточно хорошо известны такие модельные зависимости:

$$\begin{aligned} \dot{\varepsilon}_p &= \frac{K_1}{d^3} \sigma, & K_1 &= B_1 \frac{\Omega \omega D_g}{k_b T} \quad (\text{Coble}); \\ \dot{\varepsilon}_p &= K_2 \sigma, & K_2 &= B_2 \frac{\Omega D_L}{k_b T} \quad (\text{Orowan}); \\ \dot{\varepsilon}_p &= \frac{K_3}{d^2} \left(\frac{\sigma}{G} \right)^2, & K_3 &= B_3 \frac{G b^3 D_g}{k_b T} \quad (\text{Nabarro-Herring}), \end{aligned}$$

где Ω — атомный объём, ω — размер граничной зоны зёрен, D_g и D_L — коэффициенты зернограничной и решёточной диффузии, k_b — постоянная Больцмана, T — температура, G — модуль сдвига, b — вектор Бюргерса, а B_i — неопределённые константы (с любыми значениями из диапазона 1...20, что может оказаться удобным при аппроксимации результатов экспериментов). Таким образом, хотя в каждом случае в выражении для коэффициента K_i содержится множество констант материала, фактически он заменяется на безразмерную мультипликативную константу, значение которой необходимо определять на основе экспериментальных данных.

Отсюда естественным образом возникла идея создания феноменологических моделей, которые изначально оперируют установленными на основе экспериментальных данных абстрактными параметрами, учитывающими совместное действие различных микроструктурных механизмов. Тем не менее, исходные микроструктурные модели продолжают играть важную роль, поскольку очерчивают физически обусловленную область изменения материальных параметров в феноменологических определяющих соотношениях.

Наиболее простой феноменологический подход, широко используемый при описании пластического одноосного растяжения (в том числе и в работах по сверхпластичности, например, в [8]), предполагает зависимость между напряжением течения, деформацией и скоростью пластической деформации вида

$$\sigma = K \varepsilon_p^N \dot{\varepsilon}_p^m, \quad (2)$$

где N отвечает за степень упрочнения, а m — параметр скоростной чувствительности материала, $m = \partial \log \sigma / \partial \log \dot{\varepsilon}_p$.

В работе [3] предложена модель с учётом вязкоупругих деформаций. Полная скорость деформации

представляется в виде суммы упругой, вязкоупругой и сверхпластической составляющих — $\dot{\varepsilon} = \dot{\varepsilon}_e + \dot{\varepsilon}_v + \dot{\varepsilon}_p$, при этом

$$\begin{aligned}\dot{\varepsilon}_v &= \lambda \sigma, \\ \dot{\varepsilon}_p &= A \frac{\sigma^2}{d^2} + B \sigma^4,\end{aligned}\quad (3)$$

где d — средний размер зерна.

Определяющие соотношения, явно учитывающие упрочнение, приведены в работе [9]:

$$\dot{\varepsilon}_p = \begin{cases} \left(\frac{\sigma - R - \sigma_y}{K} \right)^n \frac{1}{d^\alpha}, & \sigma > \sigma_y + R, \\ 0, & \sigma \leq \sigma_y + R, \end{cases}\quad (4)$$

где $n = 1/m$, R — функция упрочнения, σ_y — предел текучести. Авторами [7] предложена модификация этих соотношений на основе функции гиперболического синуса:

$$\dot{\varepsilon}_p = \begin{cases} \frac{A_0}{d^\alpha} \sinh B_0 (\sigma - R - \sigma_y), & \sigma > \sigma_y + R, \\ 0, & \sigma \leq \sigma_y + R, \end{cases}\quad (5)$$

которая лучше описывает поведение сверхпластического материала при напряжениях, близких к пределу текучести. Функция упрочнения в работах [7, 9] зависит от скорости деформации:

$$\dot{R} = C(Q - R)\dot{\varepsilon}_p.\quad (6)$$

Поскольку материал в состоянии сверхпластичности достаточно чутко реагирует на изменение размера зёрен, многие модели дополняются соответствующими зависимостями. В простейшем случае это — эволюционные уравнения роста зёрен, которые представляются либо в деформационной форме [8]:

$$\dot{d} = \frac{A_1}{d^p} + \frac{B_1}{d^q} \dot{\varepsilon}_p,\quad (7)$$

либо в виде нелинейной зависимости от напряжения [3]:

$$\dot{d} = \frac{C_1 \sigma^4 + C_2 \sigma^5}{1 + C_3 \sigma^4 d}.\quad (8)$$

В определяющих соотношениях (2)–(8), как и в других феноменологических моделях сверхпластического деформирования, материальные постоянные должны быть определены на основе имеющихся экспериментальных данных. Наиболее используемым и неплохо себя зарекомендовавшим в подобной ситуации остаётся метод наименьших квадратов (МНК). Для него разработано большое количество алгоритмов минимизации, в частности, численные методы и подходы на основе генетических алгоритмов [10].

Сами экспериментальные данные по сверхпластичности, приводимые в литературе, описывают, в большинстве случаев, один из трёх типов связи между параметрами образца в процессе одноосного нагружения. Первый тип — зависимость осевого напряжения σ от полной осевой скорости деформации $\dot{\varepsilon} = \dot{\varepsilon}_e + \dot{\varepsilon}_p$. При этом скоростные кривые $\sigma(\dot{\varepsilon})$ часто устанавливаются из испытания со ступенчатым нагружением [11], то есть из опытов на одноосное растяжение с несколькими значениями скорости захвата (каждая следующая в 2–3 раза больше предыдущей) и скачкообразным переходом между ними. При такой схеме тестирования из испытаний одного образца можно получить значения напряжения σ сразу для нескольких скоростей деформации $\dot{\varepsilon}$.

Второй тип связи — зависимость осевого напряжения от полной осевой деформации (кривые деформирования $\sigma(\varepsilon)$) — следует из эксперимента на одноосное растяжение с постоянной скоростью деформации $\dot{\varepsilon}$ (для этого скорость захвата изменяется экспоненциально [11]). Эти тесты требуют использования одного образца для каждой исследуемой пары «скорость деформации – распределение размеров зёрен».

Также в литературе приводятся зависимости третьего типа — средний размер зерна d как функция скорости деформации $\dot{\varepsilon}$ (кривые роста $d(\dot{\varepsilon})$). Точки для этих графиков получаются из эксперимента на одноосное растяжение одного образца по схеме теста с постоянной скоростью деформации $\dot{\varepsilon}$ до некоторого значения деформации, с последующей разгрузкой, охлаждением образца, микрофотографированием его шлифа и оценкой среднего размера зёрен по снимку. Такие графики довольно дорогостоящие, но они позволяют напрямую определять параметры эволюции зёрен, что невозможно никаким другим способом (в дальнейшем, для краткости, параметрами эволюции зёрен будут называться параметры, входящие в эволюционное уравнение, учитывающее изменение размера зёрен).

3. Описание алгоритма

Прежде чем перейти непосредственно к изложению алгоритма, следует обратить внимание на важную вычислительную особенность, игнорирование которой может привести к проблемам с реализацией аппроксимационных алгоритмов. С точки зрения алгоритма МНК любая модель — это не более чем функционал, переводящий набор значений параметров в набор разностей между ожидаемыми и вычисленными значениями. В зависимости от выбранного алгоритма минимизации для МНК в построении следующего приближения могут участвовать численные производные функции по параметрам модели. Поэтому при любых вычислениях с использованием МНК следует, по возможности, избегать экстремально большого разброса в значениях искомых величин.

Например, в работе [7] предлагается описывать сверхпластическое деформирование материала системой уравнений (5)–(7) с учётом аддитивности упругой и сверхпластической деформации: $\sigma = E(\varepsilon - \varepsilon_p)$. При многоступенчатом алгоритме аппроксимации для феноменологических параметров, входящих в модель, получены следующие значения: $A_0 = 4,37 \times 10^{-6}$; $B_0 = 0,0919$; $\alpha = 1,06$; $Q = 12,608$; $C = 0,666$; $A_1 = 1,28 \times 10^{-17}$; $B_1 = 9,625 \times 10^{-14}$; $\beta = \varphi = 5,0$; $E = 1000,0$ МПа. Здесь наибольшее значение порядка 10 соседствует с наименьшим — порядка 10^{-17} . Такой существенный разброс осложняет сходимость и приводит к серьёзным погрешностям в алгоритмах аппроксимации. В случае применённой в [7] модели проблема вызвана тем, что авторы этой работы напрямую подставляют в модель размерные величины (напряжение в МПа, размеры зёрен в миллиметрах, время в секундах). Это приводит к тому, что указанные параметры имеют не вполне осмысленную размерность, поскольку размерные величины входят в уравнения модели с некоторыми, не обязательно целыми, степенями. Более того, поскольку данные степени также являются параметрами модели и ищутся МНК, в процессе вычислений другие параметры, вообще говоря, меняют свою размерность.

Естественным шагом к решению этих проблем может быть перенормирование с заменой в модели всех размерных величин на их нормированные версии, что отмечалось, например, в работе [1]. Проведя нормирование размера зёрен по их характерному размеру $d_0 = 1$ мкм, скоростей деформации — по их характерному значению $\dot{\varepsilon}_p^0 = 0,001 \text{ с}^{-1}$ и напряжений — по пределу текучести $\sigma_y = 0,5$ МПа, ту же самую модель (соотношения (6) для функции упрочнения R проинтегрированы, $h = R/\sigma_y$) можно записать в виде:

$$\begin{cases} \dot{\varepsilon}_p = \frac{A}{d^\alpha} \sinh(B(\sigma - h - 1)), \\ h = H_0 (1 - \exp(-H \varepsilon_p)), \\ \dot{d} = \frac{D}{d^\beta} + \frac{G}{d^\varphi} \dot{\varepsilon}_p, \\ \sigma = E_n (\varepsilon - \varepsilon_p) \end{cases} \quad (9)$$

со значениями параметров $A = A_0 / (\dot{\varepsilon}_p^0 d_0^\alpha) = 6,614$; $B = B_0 \sigma_y = 0,046$; $\alpha = 1,06$; $H_0 = Q/\sigma_y = 25,216$; $H = C = 0,666$; $D = A_1 / \dot{\varepsilon}_p^0 d_0^{\beta+1} = 12800,0$; $G = B_1 / d_0^{\beta+1} = 96210,0$; $\beta = \varphi = 5,0$; $E_n = E/\sigma_y = 2000,0$. Здесь максимальный порядок равен 10^5 , минимальный — 10^{-2} . Разброс составляет 7 порядков, что тоже немало, однако существенно лучше исходного варианта (18 порядков). Кроме того, теперь все параметры являются «настоящими» безразмерными числами, а, значит, проблема с изменением степенных параметров отсутствует.

Итак, опишем предлагаемый алгоритм поиска значений параметров модели. Важная черта алгоритма — его универсальность в рамках рассматриваемого класса уравнений сверхпластичности: алгоритм применим к любой системе уравнений, записанной в форме (1) и любому набору экспериментальных данных, представляющих сверхпластическое деформирование посредством некоторого количества кривых, относящихся к трём указанным в конце предыдущего раздела типам. Кроме того, авторами было

использовано «универсальное» начальное приближение, не требующее априорных знаний о свойствах процесса и материала: 0 — для всех мультипликативных констант, 1 — для всех степенных. Это позволяет включать в алгоритм даже те модели, у которых заранее неизвестен диапазон изменения параметров, входящих в уравнения. Алгоритм относится к типу пошаговых, то есть формулируется как последовательность шагов, на каждом из которых определяется или уточняется оптимальное значение одного или нескольких параметров, входящих в уравнения, при этом в качестве начальных приближений выступают значения, полученные на его предыдущих шагах. Подобные пошаговые алгоритмы применялись для поиска значений параметров рядом авторов, например, в контексте сверхпластичности можно отметить работу [7], а также работу [12], в которой рассматриваются процессы пластического (вязкопластического) деформирования с нелинейным упрочнением.

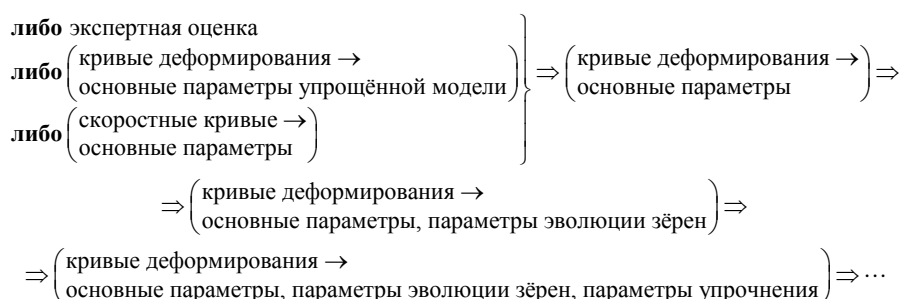
Для адаптации предлагаемого алгоритма к разным системам уравнений входящие в них параметры группируются, а именно объединяются по физическому смыслу механизма, который они описывают: основные параметры (входящие в определяющее соотношение для скорости пластических деформаций); параметры эволюции зёрен; параметры упрочнения (входящие в уравнение, представляющее упрочнение). Далее шаги алгоритма формулируются в привязке к этим группам, а не к количеству и названиям конкретных параметров.

Первый шаг алгоритма заключается в поиске основных параметров модели. Если сразу попытаться найти их на основе кривых деформирования, то процесс может не сойтись или длиться неоправданно долго. В некоторых случаях оказывается возможным временное упрощение определяющих соотношений, после чего алгоритм может приобрести сходимость. Например, определяющие соотношения (4) можно записать без учёта упрочнения и начального (упругого) участка, то есть в форме $\dot{\epsilon}_p = (A/d^\alpha) \sinh(B\sigma)$ [13]. Однако такое упрощение нужно производить индивидуально для каждого конкретного соотношения, что снижает универсальность метода, поэтому авторами настоящей работы такой путь не рассматривается.

Плохая сходимость частично связана с тем, что авторами используется универсальное начальное приближение. Если заранее (путём экспертной оценки) найдены значения параметров, близкие к искомым, можно для ускорения счёта взять их в качестве начального приближения. Если же предварительных оценок нет, либо их недостаточно для обеспечения сходимости, следует прибегнуть к так называемому «нулевому» шагу, позволяющему получить подходящую оценку параметров посредством вычислений. На этом шаге предлагается также производить поиск значений основных параметров модели, но на основе скоростных кривых, а найденные значения параметров использовать затем как начальное приближение на обсуждавшемся выше первом шаге для поиска тех же параметров, но уже на основе кривых деформирования.

Следует отметить, что данный метод применим даже тогда, когда в исходном наборе данных для материала скоростные кривые отсутствуют. В таком случае их можно построить на основе кривых деформирования, и, что следует отметить, значения параметров модели, полученные по этим кривым, оказываются достаточно удачными для того, чтобы последующий расчёт на их основе сошёлся.

На последующих шагах устанавливаются значения параметров, входящих в остальные группы (уравнения): параметров эволюции зёрен; параметров упрочнения и других (при их наличии). При этом, поскольку параметры, добавляющиеся на каждом шаге, вносят вклад в общую форму кривой, в частности изменяют характеристики упрочнения, необходимо вместе с определением их значений уточнять величину параметров из предыдущих групп. Это позволит вкладам, вносимым различными механизмами в наблюдаемый общий рост напряжений течения, корректно перераспределяться на каждом шаге. Таким образом, алгоритм можно представить в виде следующей схемы:



Такой алгоритм хорошо описывает кривые деформирования и является чисто феноменологическим в том смысле, что для его работы используются только данные макроэкспериментов (скорость деформации, уровень деформации, напряжение течения). Испытание на растяжение с постоянной скоростью деформации становится при этом одним из базовых экспериментов, служащих для идентификации модели материала. В то же время, поскольку сверхпластичность — процесс, существенно зависящий от внутреннего состояния деформируемого материала, в ряде исследовательских

работ и практических приложений важным объектом изучения и контроля служит именно микроструктура. В этой области исследуется влияние на сверхпластическое деформирование характера распределения размеров зёрен [14, 15], процессов не только роста, но и измельчения крупных зёрен вследствие деформации [3, 16, 17] и подобных микроструктурных механизмов. При этом состояние образца представляется, например, уже упоминавшейся функцией объёмной доли зёрен определённого размера $V(d)$, изменение которой отслеживается на всём протяжении процесса.

В подобной задаче от модели требуется точность описания не только макроэксперимента, но и микроструктурных параметров (среднего размера зёрен d). С этой целью авторами была разработана модификация алгоритма, учитывающая данные о росте зёрен. Модифицированный алгоритм не является феноменологическим в строгом смысле слова, поскольку оперирует данными микроструктурного эксперимента (данными со шлифа образца). Внутренняя переменная d при этом напрямую связывается с реальными микроструктурными характеристиками, но для расширения области применимости получающихся моделей подобное использование дополнительных экспериментальных данных о микроструктуре для отыскания параметра d может быть оправдано.

В предлагаемой модификации на втором шаге алгоритма на основе кривых роста диаметра зёрен определяются параметры эволюции зёрен, после чего они фиксируются и не меняются на последующем шаге (шагах) алгоритма. Схема описанного алгоритма выглядит так:

$$\left[\begin{array}{l} \text{процедуры «нулевого» и} \\ \text{первого шагов не меняются} \end{array} \right] \Rightarrow \left(\begin{array}{l} \text{кривые роста размера зёрен} \rightarrow \\ \text{параметры эволюции зёрен} \end{array} \right) \Rightarrow \\ \Rightarrow \left(\begin{array}{l} \text{кривые деформирования} \rightarrow \\ \text{основные параметры, параметры упрочнения} \end{array} \right) \Rightarrow \dots \quad (10)$$

Построенные с его помощью модели, действительно, гораздо лучше представляют эволюцию зёрен и несколько хуже — кривые деформирования. Тем не менее, получающееся приближение адекватно, поэтому данная модификация алгоритма взята авторами настоящей работы за основу при проведении вычислений.

Предложенный алгоритм был апробирован на экспериментальных данных из [11]. Все расчёты выполнялись авторами по программе, написанной на языке Python, с применением распространённой библиотеки для научных расчётов SciPy. Для поиска оптимальных значений из библиотеки вызывалась функция, производящая поиск по методу наименьших квадратов и использующая для минимизации целевой функции алгоритм Левенберга–Марквардта (реализация из вычислительной библиотеки MINPACK).

В качестве первой системы уравнений была выбрана система (5)–(7) Zhou, Dunne [7]. После нормирования (9) основными параметрами стали A , B , α , параметрами эволюции зёрен — D , G , β , φ , параметрами упрочнения — H_0 , H . Их значения, найденные с помощью предложенного алгоритма, приведены в таблице 1. Результаты расчётов по соответствующей модели представлены на рисунке 1. Здесь и далее в подписях к рисункам под ε понимается истинная (логарифмическая) деформация, под σ — истинное напряжение Коши.

Таблица 1. Найденные с помощью авторского алгоритма значения параметров системы уравнений Zhou, Dunne

| A | B | α | D | G | β | φ | H_0 | H |
|------|--------|----------|-------|------|-----------------------|-----------|-------|------|
| 67,6 | 0,0532 | 2,35 | 0,367 | 10,3 | $2,09 \times 10^{-5}$ | 0,676 | 4,89 | 3,56 |

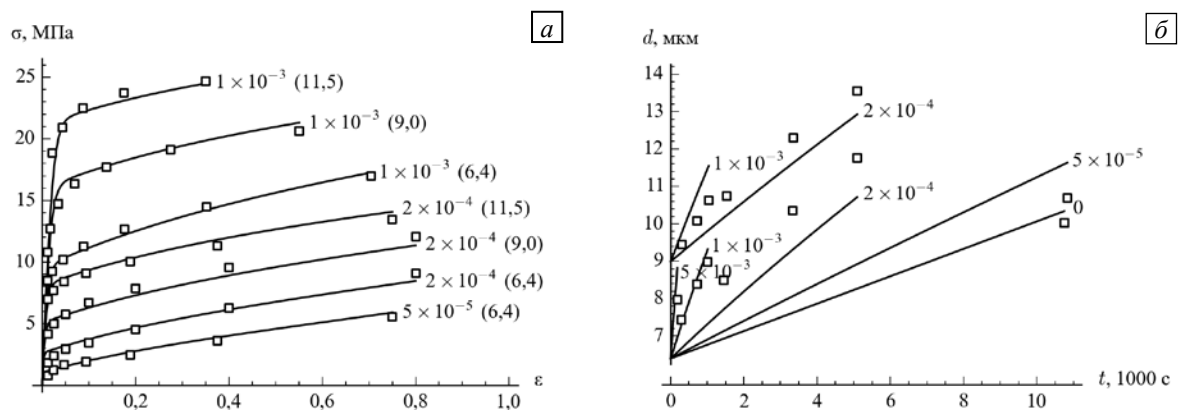


Рис. 1. Результаты расчёта по модели, построенной для системы уравнений Zhou, Dunne: кривые деформирования (а) и кривые роста размера зёрен (б); цифра возле кривой – скорость деформации (s^{-1}), цифра в скобках – начальный размер зерна (мкм); \square – экспериментальные точки

Кроме того, авторы изучили систему, использованную в работе [3], содержащую уравнения (3) и (8). В эту систему входят группы, состоящие из основных параметров λ , A , B и параметров эволюции C_1 , C_2 , C_3 ; группа параметров упрочнения отсутствует. С помощью данной системы не удалось в полной мере описать имеющиеся данные, по всей видимости, как раз из-за отсутствия уравнения для упрочнения. Но при этом эволюция зёрен представляется уравнением (8) местами успешнее, чем уравнением (7). Поэтому в качестве ещё одной пробной системы был взят набор уравнений, состоящий из основного уравнения (4) и уравнения для упрочнения (6) как в [9], с уравнением роста зёрен (8) согласно [3]. Найденные значения параметров приведены в таблице 2, результаты расчётов представлены на рисунке 2. Таким образом, алгоритм может успешно применяться для поиска значений параметров модели для разных определяющих соотношений и уравнений эволюции, в том числе комбинированного характера.

Таблица 2. Найденные с помощью алгоритма значения параметров комбинированной системы уравнений

| K | n | α | C_1 | C_2 | C_3 | H_0 | H | K |
|-------|------|----------|----------------------|-----------------------|-----------------------|-------|------|-------|
| 0,671 | 1,41 | 1,96 | $3,4 \times 10^{-4}$ | $2,55 \times 10^{-5}$ | $7,05 \times 10^{-5}$ | 8,62 | 1,29 | 0,671 |

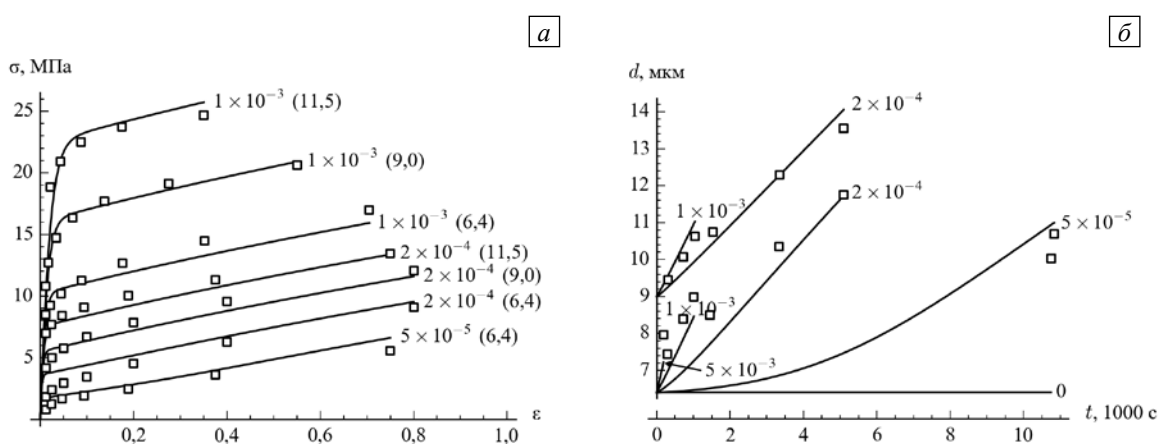


Рис. 2. Результаты расчёта по модели, построенной для комбинированной системы уравнений: кривые деформирования (а) и кривые роста размера зёрен (б); цифра возле кривой – скорость деформации (c^{-1}), цифра в скобках – начальный размер зерна (мкм); \square – экспериментальные точки

Однако с практической точки зрения интересны только модели, обладающие предсказательной силой. Любое сколь угодно удачное представление имеющейся экспериментальной информации оправдано лишь в том случае, если полученная модель пригодна для описания каких-либо других данных без априорного знания о них. Поэтому после разработки и апробации алгоритма авторы уделили основное внимание вопросам верификации.

4. Предсказательная сила моделей

Проверка алгоритма производилась по двум основным направлениям. Первое из них было связано с изменением набора экспериментальных данных для оценки способности полученных с помощью алгоритма моделей предсказывать поведение кривых, не участвовавших в поиске значений параметров. Для успешной аппроксимации необходимо, чтобы для каждой величины, являющейся внешней по отношению к модели (в данной работе — это начальный средний размер зёрен d и скорость деформации в эксперименте $\dot{\epsilon}$), в наборе кривых присутствовали зависимости, по крайней мере, для двух различных размеров зёрен и двух скоростей деформации. В противном случае параметры, регулирующие зависимость от соответствующей величины, заведомо нельзя определить корректно.

Так, например, содержащее средний размер зёрен выражение в определяющих соотношениях Zhou, Dimphe имеет вид A/d^α . При наличии в наборе кривых только для одного размера — d_u , после первого (не учитывающего рост зёрен) шага алгоритма всё приведённое выражение будет равняться некой константе \hat{A} для всех точек всех входящих в набор кривых. Следовательно, помимо найденных алгоритмом значений параметров A_u , α_u и соответствующего им значения \hat{A}_u к аналогичной форме итоговых кривых будет приводить любая пара A и α , удовлетворяющая уравнению $A/d_u^\alpha = \hat{A}_u$. Априори выбрать из этих пар правильную невозможно.

Таким образом, «критически» необходимый набор экспериментальных данных содержит две кривые (отличающиеся как размером зерна, так и скоростью деформации), а «базовый» минимальный набор —

Таблица 3. Исследованные наборы кривых для различных значений размера зерна d и скорости деформации $\dot{\epsilon}$ (по экспериментальным данным из [11])

| | $\dot{\epsilon}_1 = 0,00005 \text{ c}^{-1}$ | $\dot{\epsilon}_2 = 0,0002 \text{ c}^{-1}$ | $\dot{\epsilon}_3 = 0,001 \text{ c}^{-1}$ |
|--------------------------|---|--|---|
| $d_1 = 6,4 \text{ мкм}$ | full | full, basic, critical6402 | full, basic, critical9002 |
| $d_2 = 9,0 \text{ мкм}$ | – | full, basic, critical9002 | full, basic, critical6402 |
| $d_3 = 11,5 \text{ мкм}$ | – | full | full |

четыре кривые (все комбинации из двух скоростей и двух размеров зерна). Из исследуемых экспериментальных данных [11] выделяются наборы обоих видов. В таблице 3 схематически изображены использовавшиеся наборы и показано, какие из кривых (то есть с какой парой параметров, состоящей из диаметра зерна и скорости деформации) входят в набор **full**, которым названы сами экспериментальные данные, в «базовый» набор **basic** и в два «критических» набора *critical6402* и *critical9002*.

Помимо набора кривых на результат может оказывать влияние способ оцифровки каждой из них. «Сырые» экспериментальные данные представляют собой множество точек, формирующих кривую, однако эти точки обычно расположены очень плотно (так как время эксперимента велико, а снятие значений производится постоянно). Это приводит к тому, что при использовании всех точек система оказывается сильно переопределенной, и расчёт занимает очень большое время. Кроме того, когда данные берутся из литературы, оригинальные точки там зачастую отсутствуют, а кривые изображены в сглаженном непрерывном виде. Следовательно, в том и другом случаях необходимо взять на кривой подмножество точек, элементы которого будут участвовать в построении приближений.

Для этих целей естественным кажется выбор равномерного распределения точек от нуля до максимального доступного на кривой значения деформации (оцифровка *uniform*), но специфика кривых сверхпластического деформирования состоит в том, что наиболее существенно они изменяются на начальном участке, тогда как на конечном приближаются к прямой линии. Поэтому в качестве альтернативы можно предложить точки, распределённые логарифмически, то есть с абсциссами, построенными по следующей процедуре: на кривой берётся максимально доступное значение деформации и последовательно делится на одно и то же число несколько раз (оцифровка *log*).

В настоящей работе авторами опробованы оба описанных способа оцифровки, причём количество точек для них было одинаковым. Отметим, что, помимо рассмотрения разных оцифровок, возможен подход, при котором важность некоторых участков кривой увеличивается посредством введения весовых коэффициентов в основное уравнение МНК. Например, подобный метод применён в [18] для задачи определения параметров моделей пластического (вязкопластического) деформирования с нелинейным упрочнением по экспериментальным кривым.

Для объективного, а не чисто визуального сравнения кривых, рассчитанных по модели, с экспериментальными необходимо выбрать метрику. Погрешность в конкретной точке можно найти как величину относительной разности значений: $\Delta_{ij} = |c_{ij} - e_{ij}| / e_{ij}$, где Δ_{ij} — погрешность в i -й точке j -й кривой, c_{ij} — вычисленное по модели значение в этой точке, e_{ij} — ожидаемое (экспериментальное) значение. Взятие по модулю нужно для того, чтобы разнонаправленные погрешности не компенсировали друг друга при суммировании.

Далее предлагается проводить оценку погрешности двумя путями. Первый из них заключается в вычислении средней погрешности для j -й кривой: $\Delta_{\text{avg},j} = \sum_{i=1}^{n_j} \Delta_{ij} / n_j$, где n_j — количество точек на j -й кривой, и по ней — общей средней погрешности по всем точкам всех кривых: $\Delta_{\text{avg}} = \sum_{j=1}^N \sum_{i=1}^{n_j} \Delta_{ij} / \sum_{j=1}^N n_j$, где N — количество кривых в наборе. При этом в качестве опорных точек необходимо брать равномерно распределённые, поскольку в противном случае ошибка на участке с концентрацией точек даст больший вклад в общую погрешность, чем ошибка на участке с их меньшим числом. Погрешность, найденную таким образом, будем называть «погрешностью по среднему». Такое усреднение хорошо показывает величину систематической ошибки, из-за которой расчётная кривая по всей длине отклоняется от ожидаемой.

Однако по метрике по среднему плохо идентифицируются те кривые, которые в целом приближают экспериментальные зависимости хорошо, но плохо описывают их форму в начале или в конце, когда они резко, как правило, «задираются» вверх. Для таких случаев пойдём по другому пути: введём вторую метрику. Для j -й кривой вычислим её как максимум погрешностей во всех точках: $\Delta_{\text{max},j} = \max_{i=1}^{n_j} \Delta_{ij}$. Для получения значения общей погрешности — Δ_{max} , эти величины усредним по числу кривых в наборе:

$\Delta_{\text{max}} = \sum_{j=1}^N \Delta_{\text{max},j} / N$. Здесь в качестве опорных точек разумно рассматривать распределённые логарифмически, поскольку именно они при определении максимума $\Delta_{\text{max},j}$ позволяют учитывать погрешность как в начале, так и на конце кривой. Следует заметить, что среди кривых в наборе проводится

не простой выбор максимального из всех $\Delta_{\max,j}$, а усреднение, иначе в результирующем значении оказалась бы потерянной информация обо всех кривых набора кроме одной, что сделало бы эту метрику малоинформативной при сравнении разных наборов кривых между собой. Погрешность, рассчитанную таким образом, будем называть далее как «погрешность по максимуму».

В таблице 4 приведены общие погрешности представления экспериментальных данных системами уравнений Zhou, Dunne и комбинированной для различных наборов кривых при разных способах их оцифровки (log или uniform). Указаны общие по набору погрешности по среднему — Δ_{avg} , и по максимуму — Δ_{max} (в скобках). Ячейки таблицы на пересечении строки log и столбца **full** соответствуют моделям, результаты расчёта по которым приведены на рисунках 1 и 2. Видно, что выбранные метрики, действительно, приводят к ожидаемым результатам: комбинированная система уравнений описывает экспериментальные данные немного хуже системы Zhou, Dunne в смысле погрешности по среднему и заметно хуже по отношению к погрешности по максимуму, что связано с существенно большей погрешностью на начальных участках кривых, отвечающих размеру зёрен 6,4 мкм и скоростям деформации $5 \times 10^{-5} \text{c}^{-1}$ и, особенно, $2 \times 10^{-4} \text{c}^{-1}$.

Таблица 4. Общие погрешности моделирования экспериментальных данных при разных наборах кривых с их различной оцифровкой

| Набор кривых \ Способ оцифровки | full | <i>basic</i> | <i>critical6402</i> | <i>critical9002</i> |
|-----------------------------------|--------------|--------------|---------------------|---------------------|
| Система уравнений Zhou, Dunne | | | | |
| log | 3,85 (23,58) | 5,75 (24,45) | 17,22 (27,4) | 33,55 (63,23) |
| uniform | 3,58 (25,03) | 3,78 (30,4) | – | – |
| Комбинированная система уравнений | | | | |
| log | 6,71 (42,84) | 9,83 (34,55) | 42,59 (60,19) | 26,9 (55,79) |
| uniform | 4,79 (57,56) | 5,13 (50,93) | – | – |

Для значений из таблицы 4, относящихся к системе уравнений Zhou, Dunne, также приводятся графики погрешностей по отдельным кривым для различных наборов и способов оцифровки (Рис. 3, 4). Показанные результаты подтверждают сделанное предположение о том, что набор из четырёх кривых (*basic*) достаточен для построения модели, обладающей предсказательной силой. Общая погрешность, как и ожидалось, возрастает по сравнению с погрешностью, имеющей место при использовании полного набора (**full**), однако погрешности для конкретных кривых распределены похожим образом. В целом все погрешности остаются в пределах разумного. В то же время уменьшение количества кривых в наборе

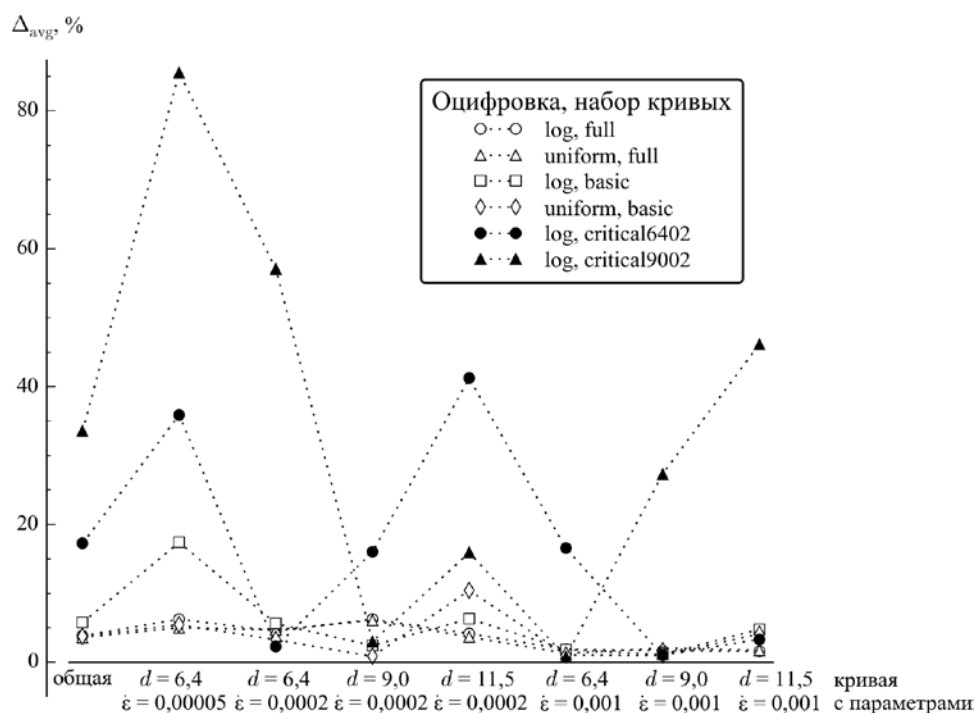


Рис. 3. Погрешности по среднему для отдельных кривых, система уравнений Zhou, Dunne

до двух (наборы *critical6402* и *critical9002*) приводит к резкому росту погрешности аппроксимации, причём моделями при получаемых значениях параметров корректно описываются только те кривые, по которым модель рассчитывалась. Распределение погрешностей для конкретных кривых становится совершенно не похожим на распределение для полного набора (оно имеет ярко выраженные пики и провалы). Таким образом, присутствие в наборе кривых, относящихся к разным размерам зёрен и скоростям деформации, само по себе не гарантирует наличия у модели предсказательной силы.

Кроме того, можно видеть (см. Рис 3, 4), что при одинаковом наборе кривых оцифровка *uniform* показывает лучшее значение погрешности по среднему, однако проигрывает оцифровке *log* при оценке погрешности по максимуму. Это согласуется с ожиданиями, поскольку модель на основе равномерно распределённых точек имеет меньше информации о форме кривой в её начале (то есть именно там, где погрешность Δ_{\max} наибольшая), в то время как модель, построенная по логарифмически сконцентрированным к началу кривой точкам, описывает эту область лучше, но ценой этого является изменение формы всей кривой, в том числе более длинного финального участка (что и приводит к худшему приближению по среднему).

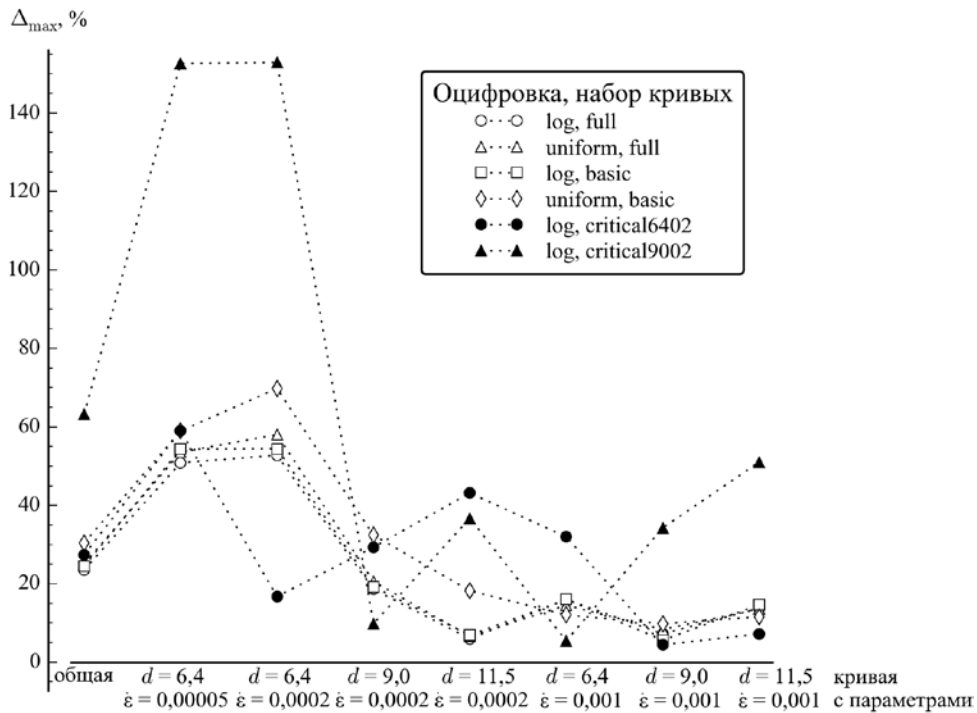


Рис. 4. Погрешности по максимуму для отдельных кривых, система уравнений Zhou, Dunne

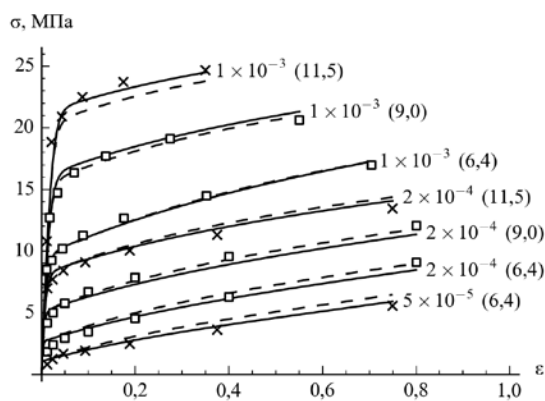


Рис. 5. Кривые, полученные по модели, построенной по набору *full* (сплошная линия) и по 4-м кривым (штриховая линия); цифра возле кривой – скорость деформации (с^{-1}); цифра в скобках – начальный размер зерна (мкм); \square – экспериментальные точки, входившие в оба набора; \times – экспериментальные точки, входившие только в полный набор

В заключение приведём график (см. Рис. 5), построенный по моделям, полученным на основе «полного» и «базового» наборов кривых деформирования для системы уравнений Zhou, Dunne при оцифровке *log* (соответствующие значения погрешностей см. в ячейках (*log, full*) и (*log, basic*) таблицы 4). Как и предполагалось теоретически, модель по неполному набору данных чуть лучше приближает кривые, по которым она была построена, но хуже — все остальные. Заметим, однако, что приближение кривой, не участвовавшей в определении параметров, но проходящей между входившими в набор кривыми (а именно $d = 11,5$ мкм, $\dot{\varepsilon} = 2 \times 10^{-4}$), меньше отличается от приближения по полному набору, чем приближения кривых, расположенных по краям (то есть

с $d = 6,4$ мкм, $\dot{\varepsilon} = 5 \times 10^{-5}$ и $d = 11,5$ мкм, $\dot{\varepsilon} = 1 \times 10^{-3}$). Это также подтверждается графиками погрешностей по отдельным кривым (см. Рис. 3, 4). Таким образом, по мере удаления параметров контрольного эксперимента от параметров экспериментов, использовавшихся для поиска значений параметров модели, погрешность аппроксимации возрастает.

5. Устойчивость алгоритма к погрешностям экспериментальных данных

Вторым важным направлением верификации получаемых с помощью алгоритма моделей является проверка на устойчивость. В данном случае под устойчивостью понимается способность аппроксимирующих кривых игнорировать (сглаживать) присутствующий в данных шум. Важность данного вопроса в контексте общей методологии разработки и аттестации моделей подчёркивается в [1].

Одним из методов анализа такой устойчивости является вычисление корреляционной матрицы параметров [19]. Другой возможный подход заключается в наложении случайного шума на уже имеющиеся или специально генерируемые входные данные и оценке происходящих вслед за этим изменений в модели. Так, в уже упоминавшейся статье [18] авторы используют подобный подход для выбора оптимальных весовых коэффициентов МНК. В работе минимизируется размер «облака параметров», который вычисляется путём линейаризации функционала ошибки при многократно наложенном случайном шуме. Генерируемые случайные данные рассматриваются, например, в [20].

В настоящей статье к системам уравнений сверхпластичности из исследуемого класса применен похожий подход. Вызванная шумом ошибка оценивалась с помощью введенных авторами в предыдущем разделе метрик, учитывающих характерные особенности сверхпластического деформирования. При этом, поскольку для вычисления этих метрик требуется построение соответствующих кривых, линейаризация не использовалась, а к зашумлённым данным применялся полный алгоритм нахождения параметров модели.

Итак, для моделирования случайного шума в экспериментальных данных к каждой точке каждой кривой деформирования по оси ординат (то есть к напряжениям) добавлялось случайное равномерно распределённое отклонение в пределах 5%. Иными словами, над данными производилось преобразование по формуле $\tilde{\sigma}_{ij} = (0,95 + 0,1\eta) \cdot \sigma_{ij}$, где σ_{ij} — напряжение в i -й точке j -й кривой; тильдой обозначено изменённое значение, η — стандартная (то есть на отрезке $[0, 1]$) равномерно распределённая непрерывная случайная величина.

По модифицированному набору данных с помощью предложенного алгоритма по схеме (10) определялись значения параметров. Скоростные кривые и кривые роста зёрен при этом не изменялись. В качестве начального выступало «универсальное» приближение, то есть алгоритм не обладал какой-либо информацией о модели, полученной по исходным (неизменённым) данным.

Поскольку накладываемый шум имел случайную статистическую природу, была проведена серия из 26 расчётов, в каждом из которых шум накладывался заново, независимо от предыдущих. После этого вычислялась средняя по всей серии погрешность (общая и для каждой кривой; метрики совпадали с описанными выше), а также дисперсия погрешностей. Результаты расчётов приведены в таблице 5.

Таблица 5. Средние по серии значения погрешности и дисперсии погрешностей из расчётов с зашумлёнными экспериментальными данными на основе системы уравнений Zhou, Dunne

| Кривая ($d; \dot{\varepsilon} \times 10^3$) | Средняя погрешность $\Delta_{\text{avg}} (\Delta_{\text{max}})$ | Дисперсия погрешности $\Delta_{\text{avg}} (\Delta_{\text{max}})$ |
|--|--|--|
| Общая | 3,91 (23,77) | 0,38 (0,65) |
| (6,4; 0,05) | 6,4 (51,28) | 2,56 (1,31) |
| (6,4; 0,2) | 4,6 (53,32) | 0,89 (2,4) |
| (6,4; 1,0) | 1,89 (15,83) | 0,43 (0,72) |
| (9,0; 0,2) | 6,2 (18,6) | 0,76 (1,7) |
| (9,0; 1,0) | 2,06 (7,48) | 0,63 (0,76) |
| (11,5; 0,2) | 4,1 (6,18) | 1,12 (1,49) |
| (11,5; 1,0) | 1,48 (13,73) | 0,51 (0,42) |

Для расчётов из серии, показавших самую большую и самую маленькую погрешности, построены полные изображения кривых (Рис. 6). Нетрудно заметить, что визуально результаты мало отличаются друг от друга, что осложняет построение гипотез о влиянии характера наложенного шума на получаемую погрешность. Это связано с тем, что, как видно из таблицы 5, дисперсия погрешностей мала, то есть разница между крайними случаями незаметна на фоне общей погрешности. Поэтому авторами была предпринята попытка разделить наблюдаемые эффекты и увидеть «чистую» ошибку, возникающую при наложении случайного шума.

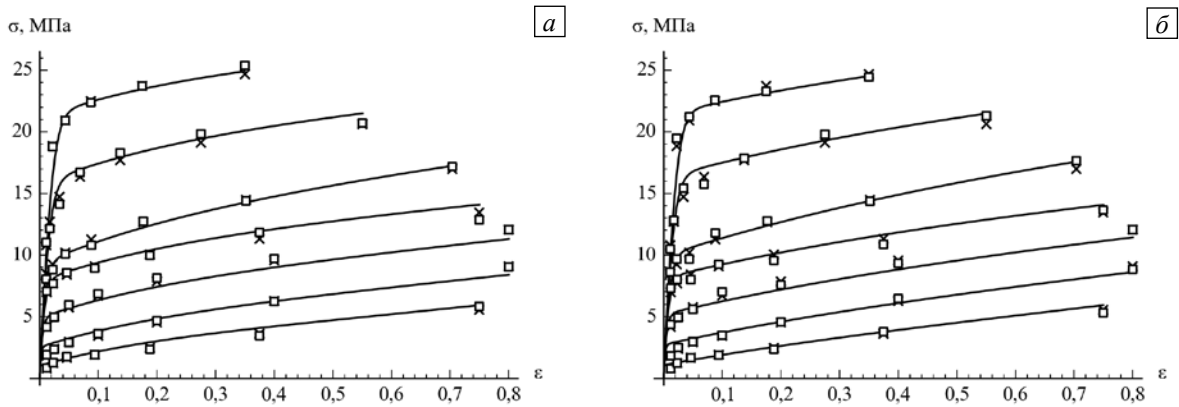


Рис. 6. Результаты расчёта по моделям из расчётной серии, показавшим максимальную (а) и минимальную (б) погрешности; □ – точки с наложенным шумом, использовавшиеся для поиска параметров, × – оригинальные экспериментальные данные (Рис. 1)

Для этого был построен искусственный (модельный) набор данных, в котором набор кривых и абсциссы точек совпадали с оригинальными экспериментальными данными, а ординаты (значения напряжений) вычислялись по модели, построенной на основании этих данных с помощью описанного алгоритма (кривые на Рис. 1). Далее, для этого искусственного набора осуществлялся тот же анализ на устойчивость: накладывался шум, проводилась серия из 26 расчётов, определялись средние погрешности и дисперсии погрешностей. Результаты расчётов приведены в таблице 6.

Таблица 6. Средние по серии значения погрешности и дисперсии погрешностей из расчётов с зашумлёнными модельными данными на основе системы уравнений Zhou, Dunne

| Кривая ($d; \dot{\varepsilon} \times 10^3$) | Средняя погрешность $\Delta_{\text{avg}} (\Delta_{\text{max}})$ | Дисперсия погрешности $\Delta_{\text{avg}} (\Delta_{\text{max}})$ |
|--|--|--|
| Общая | 1,06 (1,78) | 0,4 (0,69) |
| (6,4; 0,05) | 1,98 (3,33) | 0,93 (1,69) |
| (6,4; 0,2) | 1,18 (2,28) | 0,58 (0,88) |
| (6,4; 1,0) | 0,81 (1,5) | 0,5 (0,79) |
| (9,0; 0,2) | 0,8 (1,63) | 0,39 (0,73) |
| (9,0; 1,0) | 0,68 (1,01) | 0,52 (0,6) |
| (11,5; 0,2) | 0,89 (1,54) | 0,53 (0,96) |
| (11,5; 1,0) | 1,0 (1,17) | 0,57 (0,57) |

На искусственном наборе значения дисперсий погрешностей сохранились на том же уровне, что и при наложении шума на оригинальные экспериментальные данные, тогда как средние значения уменьшились в несколько раз. Таким образом, допустимо представить погрешность на зашумлённых экспериментальных данных δ_e как сумму $\delta_e = \delta_0 + \delta_m$, где δ_0 — отклонение модельных данных от экспериментальных, δ_m — погрешность на самих модельных данных. Первое слагаемое δ_0 не зависит от наложенного шума и показывает, насколько удачно выбранная модель способна описать имеющиеся экспериментальные данные; второе же слагаемое δ_m показывает собственно реакцию модели на наложенный шум. Для данной серии также были построены полные изображения кривых по данным из расчётов, показавших самую большую и самую маленькую погрешность (Рис. 7).

Как и ожидалось, на этих кривых отличие результатов более заметно, что позволяет сделать некоторые выводы о зависимости погрешности от характера шума. Видно, что максимальная погрешность наблюдается в случае, когда на начальном участке кривых шум преимущественно занижает значения, а на финальном участке в основном завышает. Такие отклонения могут быть описаны моделью систематически, а потому расчёт по алгоритму приводит к кривой с изменённой формой: с более пологим начальным участком и более крутым финальным, а также к сдвигу из оригинального положения. Минимальная погрешность, напротив, наблюдается при отклонениях, более-менее чередующихся в сторону завышения и занижения наклона. При этом отклонения компенсируют друг друга, приближая кривую — результат работы алгоритма, к промежуточному положению, которое неизбежно оказывается близко к оригинальному.

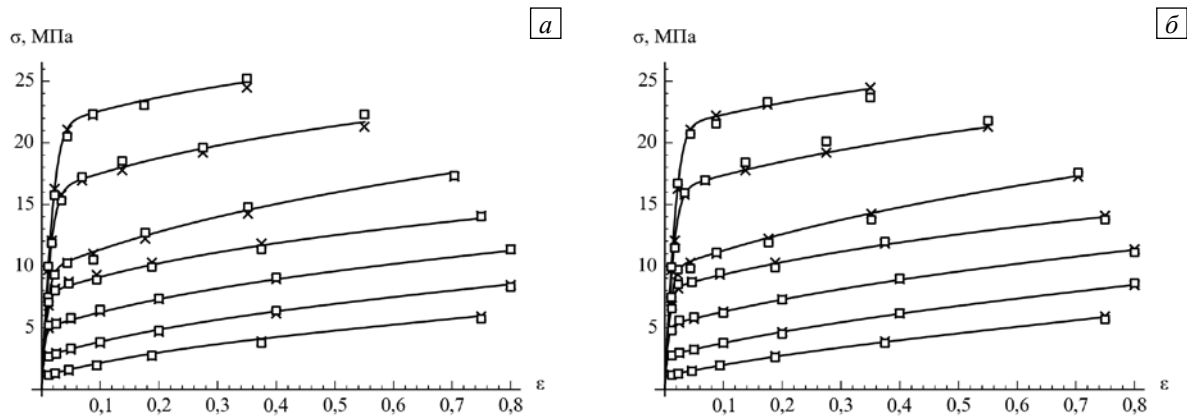


Рис. 7. Результаты расчёта по моделям из искусственной серии, показавшим максимальную (а) и минимальную (б) погрешности; □ – точки с наложенным шумом, использовавшиеся для поиска параметров, × – точки, полученные по исходной модели (аналог экспериментальных данных; порядок кривых совпадает с рисунками 1 и 6)

Необходимо отметить, что данная серия вычислений осуществлялась в два этапа: сначала путём 13 расчётов определялись средние значения и дисперсии погрешностей, после чего в следующих 13 расчётах находились те же величины для полной серии (их значения и приведены в таблице 6). Отличие погрешностей первой части от погрешностей полной серии составило доли процента, что свидетельствует о получении корректных средних значений погрешностей уже после 10–15 расчётов с независимым наложением шума. Увеличение числа расчётов не вносит принципиальных изменений в результат, а лишь незначительно уточняет его.

Аналогичные расчёты проделаны и по комбинированной системе уравнений. В соответствии с предлагаемой методикой они основывались на искусственных (модельных) данных, очищенных от влияния исходной погрешности. Значения средних погрешностей и дисперсий для этой серии содержит таблица 7.

Наконец приведём значения параметров моделей с максимальной и минимальной погрешностью (Табл. 8, 9) и сравним их с данными для оригинальных моделей (Табл. 1, 2). Сильное изменение параметра β

Таблица 7. Средние по серии значения погрешности и дисперсии погрешностей из расчётов с зашумлёнными модельными данными по комбинированной системе уравнений

| Кривая ($d; \dot{\epsilon} \times 10^3$) | Средняя погрешность $\Delta_{\text{avg}} (\Delta_{\text{max}})$ | Дисперсия погрешности $\Delta_{\text{avg}} (\Delta_{\text{max}})$ |
|---|--|--|
| Общая | 1,12 (1,87) | 0,4 (0,66) |
| (6,4; 0,05) | 2,05 (3,4) | 0,8 (1,32) |
| (6,4; 0,2) | 1,16 (2,38) | 0,65 (1,13) |
| (6,4; 1,0) | 1,04 (1,59) | 0,59 (0,75) |
| (9,0; 0,2) | 0,86 (1,81) | 0,48 (0,7) |
| (9,0; 1,0) | 0,85 (1,18) | 0,54 (0,8) |
| (11,5; 0,2) | 0,88 (1,54) | 0,55 (0,86) |
| (11,5; 1,0) | 0,95 (1,18) | 0,61 (0,65) |

Таблиц 8. Значения параметров оригинальной модели и расчётных моделей с зашумлёнными модельными данными, показавших минимальную и максимальную погрешности (система уравнений Zhou, Dunne)

| Параметр | Оригинальная модель | Модель с наименьшей погрешностью | Модель с наибольшей погрешностью |
|-----------|-----------------------|----------------------------------|----------------------------------|
| A | 67,6 | 62,0 | 61,4 |
| B | 0,0532 | 0,0534 | 0,0497 |
| α | 2,35 | 2,32 | 2,26 |
| D | 0,367 | 0,367 | 0,367 |
| G | 10,3 | 10,3 | 10,3 |
| β | $2,09 \times 10^{-5}$ | $1,2 \times 10^{-4}$ | $4,77 \times 10^{-4}$ |
| φ | 0,676 | 0,677 | 0,678 |
| H_0 | 4,89 | 4,92 | 5,4 |
| H | 3,56 | 3,3 | 4,03 |

Таблица 9. Значения параметров оригинальной модели и расчётных моделей с с зашумлёнными модельными данными, показавших минимальную и максимальную погрешности (комбинированная система уравнений)

| Параметр | Оригинальная модель | Модель с наименьшей погрешностью | Модель с наибольшей погрешностью |
|----------|-----------------------|----------------------------------|----------------------------------|
| K | 0,671 | 0,66 | 0,661 |
| n | 1,41 | 1,42 | 1,42 |
| α | 1,96 | 1,96 | 1,96 |
| C_1 | $3,4 \times 10^{-4}$ | $3,73 \times 10^{-4}$ | $4,01 \times 10^{-4}$ |
| C_2 | $2,55 \times 10^{-5}$ | $3,81 \times 10^{-5}$ | $4,13 \times 10^{-5}$ |
| C_3 | $7,05 \times 10^{-5}$ | $9,68 \times 10^{-5}$ | $1,03 \times 10^{-4}$ |
| H_0 | 8,62 | 9,82 | 9,9 |
| H | 1,29 | 1,07 | 1,0 |

системы уравнений Zhou, Dunne связано с тем, что его оригинальное значение крайне мало. Этот параметр отвечает за статический (в условиях отсутствия нагрузки) рост зёрен, но экспериментальные данные содержат лишь один эксперимент такого вида, в силу чего значение параметра не может быть определено алгоритмом полноценно. Значения остальных параметров изменяются в небольших пределах, что позволяет говорить об устойчивости не только в смысле аппроксимации кривых деформирования, но и в смысле полученных параметров модели. Важно отметить, что значения некоторых параметров моделей, показавших максимальную и минимальную погрешности, отличаются друг от друга меньше, чем каждое из них от исходного. Это ещё раз подчёркивает сильную нелинейную связь между параметрами и моделирующими экспериментальные данные кривыми и исключает возможность использования при сравнении моделей метрик, основанных только на значениях входящих в модель параметров (без учёта формы кривых, получаемых по моделям).

6. Заключение

Подбор подходящих значений параметров, входящих в системы уравнений, описывающих сверхпластическое деформирование материалов, является актуальной задачей, неизбежно возникающей при проведении технологических расчётов и решении краевых задач сверхпластичности. Данной теме посвящено множество работ разных авторов, в которых предлагаются различные определяющие соотношения и уравнения эволюции, в большей или меньшей степени основанные на физической интерпретации микроструктурных механизмов. Для соотношений разрабатываются алгоритмы вычисления значений параметров, зачастую сложные и многоступенчатые, создаваемые под конкретный вид системы уравнений. Близость к оригиналу полученных моделей оцениваются, как правило, субъективно.

В настоящей работе предпринята попытка унифицировать подход к определению параметров моделей для конкретной, но достаточно широкого класса систем уравнений сверхпластичности. Приведена схема алгоритма, который универсален и не привязан к конкретным уравнениям, и предложены метрики, численно выражающие степень приемлемости построенного по модели приближения. В терминах этих метрик оказывается возможным создание методики проверки корректности и устойчивости моделей с параметрами, вычисляемыми с помощью того или иного алгоритма. Адекватность метрик подтверждается результатами проведённого на их основе сравнения моделей, построенных при разных входных данных. В том числе показано, что найденные с использованием предложенного алгоритма модели обладают предсказательной силой.

Важно, что введённые метрики не связаны напрямую ни с определяющими соотношениями, ни с предложенным алгоритмом и представляют собой самостоятельный инструмент для объективной оценки качества моделей сверхпластичности. При этом величины погрешностей модели при аппроксимации экспериментальных данных, из которых она и получена, не свидетельствуют об ошибке алгоритма, а являются свойством пары «набор кривых – система уравнений». Следовательно, предложенные метрики косвенно позволяют установить меру способности выбранной системы уравнений к адекватному описанию конкретных экспериментальных данных.

Авторы выражают искреннюю благодарность Р.А. Васину за плодотворное обсуждение и ценные замечания к тексту статьи.

Литература

1. Васин Р.А., Еникеев Ф.У. Введение в механику сверхпластичности. – Уфа: Гилем, 1998. – Ч. 1. – 280 с.
2. Nieh T.G., Wadsworth J., Sherby O.D. Superplasticity in metals and ceramics. – Cambridge: Cambridge University Press, 1997. – 287 p. [DOI](#)

3. Быля О.И., Васин Р.А. Деформирование сплавов в режиме сверхпластичности и близких к нему режимах // Известия Тульского государственного университета. Естественные науки. – 2011, № 2. – С. 116-128.
4. Сверхпластичность ультрамелкозернистых сплавов: эксперимент, теория, технология / Под ред. Р.Р. Мулюкова, Р.М. Имаева, А.А. Назарова, М.Ф. Имаева, В.М. Имаева. – М.: Наука, 2014. – 284 с.
5. Lin J., Dunne F.P.E. Modelling grain growth evolution and necking in superplastic blow-forming // *Int. J. Mech. Sci.* – 2001. – Vol. 43, no. 3. – P. 595-609. [DOI](#)
6. Работнов Ю.Н. Механика деформируемого твердого тела. – М.: Наука, 1979. – 744 с.
7. Zhou M., Dunne F.P.E. Mechanisms-based constitutive equations for the superplastic behaviour of a titanium alloy // *The Journal of Strain Analysis for Engineering Design.* – 1996. – Vol. 31, no. 3. – P. 187-196. [DOI](#)
8. Cheong B.H., Lin J., Ball A.A. Modelling of the hardening characteristics for superplastic material // *Journal of Strain Analysis for Engineering Design.* – 2000. – Vol. 35, no. 3. – P. 149-157. [DOI](#)
9. Lin J., Dunne F.P.E., Hayhurst D.R. Physically based temperature dependence of elastic-visco-plastic constitutive equations for copper between 20 and 500 °C // *Philosophical Magazine A.* – 1996. – Vol. 74. – P. 359-382. [DOI](#)
10. Lin J., Yang J. GA-based multiple objective optimisation for determining viscoplastic constitutive equations for superplastic alloys // *Int. J. Plast.* – 1999. – Vol. 15, no. 11. – P. 1181-1196. [DOI](#)
11. Ghosh A.K., Hamilton C.H. Mechanical behavior and hardening characteristics of a superplastic Ti-6Al-4V alloy // *Metall. Trans. A.* – 1979. – Vol. 10, no. 6. – P. 699-706. [DOI](#)
12. Shutov A.V., Kuprin C., Ihlemann J., Wagner M.F.-X., Silbermann C. Experimentelle Untersuchung und numerische Simulation des inkrementellen Umformverhaltens von Stahl 42CrMo4 // *Mat.-wiss. u. Werkstofftech.*, – 2010. – Vol. 41, no. 9. – P. 765-775. [DOI](#)
13. Kim T.-W., Dunne F.P.E. Determination of superplastic constitutive equations and strain rate sensitivities for aerospace alloys // *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part G: Journal of Aerospace Engineering.* – 1997. – Vol. 211, no. 6. – P. 367-380. [DOI](#)
14. Kim T.-W., Dunne F.P.E. Modelling heterogeneous microstructures in superplasticity // *Proc. R. Soc. Lond. A.* – 1999. – Vol. 455, no. 1982. – P. 701-718. [DOI](#)
15. Dunne F.P.E., Kim T.-W. Inhomogeneous deformation and failure in superplasticity // *Proc. R. Soc. Lond. A.* – 1999. – Vol. 455, no. 1982. – P. 719-735. [DOI](#)
16. Быля О.И., Прадхан Б.К., Якушина Е.Б., Блаквелл П.Л., Васин Р.А. Моделирование активной трансформации микроструктуры двухфазных Ti сплавов во время горячей деформации alloys during hot working // *Письма о материалах.* – 2014. – Т. 4, № 2. – С. 124-129. (English version [DOI](#))
17. Ghosh A.K., Raj R. A model for the evolution of grain size distribution during superplastic deformation // *Acta. Met.* – 1986. – Vol. 34, no. 3. – P. 447-456. [DOI](#)
18. Shutov A.V., Kaygorodtseva A.A., Dranishnikov N.S. Optimal error functional for parameter identification in anisotropic finite strain elasto-plasticity // *Journal of Physics: Conference Series.* – 2017. – Vol. 894, no. 1. – P. 012133. [DOI](#)
19. Shutov A.V., Kreißig R. Regularized strategies for material parameter identification in the context of finite strain plasticity // *Technische Mechanik.* – 2010. – Vol. 30, no. 1-3. – P. 280-295.
20. Harth T., Schwan S., Lehn J., Kollmann F.G. Identification of material parameters for inelastic constitutive models: statistical analysis and design of experiments // *Int. J. Plast.* – 2004. – Vol. 20, no. 8-9. – P. 1403-1440. [DOI](#)

References

1. Vasin R.A., Enikeev F.U. *Vvedenie v mehaniku sverkhplastichnosti* [Introduction to the mechanics of the superplasticity]. Ufa, Gilem, 1998. Vol. 1. 280 p.
2. Nieh T.G., Wadsworth J., Sherby O.D. *Superplasticity in metals and ceramics.* Cambridge, Cambridge University Press, 1997. 287 p. [DOI](#)
3. Bylya O.I., Vasin R.A. Deformirovanie spлавov v rezhime sverkhplastichnosti i blizkikh k nemu rezhimakh. [Deformation of the alloys in the superplastic regime and nearby regimes]. *Izvestiya Tuls'kogo gosudarstvennogo universiteta. Estestvennye nauki – Tidings of the Tula State University. Natural science*, 2011, no. 2, pp. 116–128.
4. Mulyukov R.R. (ed.), Imaev R.M. (ed.), Nazarov A.A. (ed.), Imaev M.F. (ed.), Imaev V.M. (ed.) *Sverkhplastichnost' ultramelkozernistykh spлавov: eksperiment, teoriya, tekhnologiya* [Superplasticity of ultrafine grained alloys: experiment, theory, technology]. Moscow, Nauka, 2014. 284 p.
5. Lin J., Dunne F.P.E. Modelling grain growth evolution and necking in superplastic blow-forming. *Int. J. Mech. Sci.*, 2001, vol. 43, no. 3, pp. 595–609. [DOI](#)
6. Rabotnov U.N. *Mehanika deformiruemogo tverdogo tela* [Mechanics of deformable solids]. Moscow, Nauka, 1979. 744 p.
7. Zhou M., Dunne F.P.E. Mechanisms-based constitutive equations for the superplastic behaviour of a titanium alloy. *Journal of Strain Analysis for Engineering Design*, 1996, vol. 31, no. 3, pp. 187–196. [DOI](#)
8. Cheong B.H., Lin J., Ball A.A. Modelling of the hardening characteristics for superplastic material. *Journal of Strain Analysis for Engineering Design*, 2000, vol. 35, no. 3, pp. 149–157. [DOI](#)
9. Lin J., Dunne F.P.E., Hayhurst D.R. Physically based temperature dependence of elastic-visco-plastic constitutive equations for copper between 20 and 500 °C. *Philosophical Magazine A*, 1996, vol. 74, no. 2, pp. 359–382. [DOI](#)
10. Lin J., Yang J. GA-based multiple objective optimisation for determining viscoplastic constitutive equations for superplastic alloys. *Int. J. Plast.*, 1999, vol. 15, no. 11, pp. 1181–1196. [DOI](#)
11. Ghosh A.K., Hamilton C.H. Mechanical behavior and hardening characteristics of a superplastic Ti-6Al-4V alloy. *Met. Trans. A*, 1979, vol. 10, no. 6, pp. 699–706. [DOI](#)
12. Shutov A.V., Kuprin C., Ihlemann J., Wagner M.F.-X., Silbermann C. Experimentelle Untersuchung und numerische Simulation des inkrementellen Umformverhaltens von Stahl 42CrMo4. *Mat.-wiss. u. Werkstofftech.*, 2010, vol. 41, no. 9, pp. 765–775. [DOI](#)

13. Kim T.-W., Dunne F.P.E. Determination of superplastic constitutive equations and strain rate sensitivities for aerospace alloys. *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part G: Journal of Aerospace Engineering*, 1997, vol. 211, no. 6, pp. 367–380. [DOI](#)
14. Kim T.-W., Dunne F.P.E. Modelling heterogeneous microstructures in superplasticity. *Proc. R. Soc. Lond. A*, 1999, vol. 455, no. 1982, pp. 701–718. [DOI](#)
15. Dunne F.P.E., Kim T.-W. Inhomogeneous deformation and failure in superplasticity. *Proc. R. Soc. Lond. A*, 1999, vol. 455, no. 1982, pp. 719–735. [DOI](#)
16. Bylya O.I., Pradhan B.K., Yakushina E.B., Blackwell P.L., Vasin R.A. Modelling of active transformation of microstructure of two-phase Ti alloys during hot working. *Letters on materials*, 2014, vol. 4, no. 2, pp. 124–129. [DOI](#)
17. Ghosh A.K., Raj R. A model for the evolution of grain size distribution during superplastic deformation. *Acta Metall.*, 1986, vol. 34, no. 3, pp. 447–456. [DOI](#)
18. Shutov A.V., Kaygorodtseva A.A., Dranishnikov N.S. Optimal error functional for parameter identification in anisotropic finite strain elasto-plasticity. *Journal of Physics: Conference Series*, 2017, vol. 894, no. 1, pp. 012133. [DOI](#)
19. Shutov A.V., Kreißig R. Regularized strategies for material parameter identification in the context of finite strain plasticity. *Technische Mechanik*, 2010, vol. 30, no. 1–3, pp. 280–295.
20. Harth T., Schwan S., Lehn J., Kollmann F.G. Identification of material parameters for inelastic constitutive models: statistical analysis and design of experiments. *Int. J. Plast.*, 2004, vol. 20, no. 8-9, pp. 1403–1440. [DOI](#)

Поступила в редакцию 29.11.2017; опубликована в электронном виде 30.03.2018.

Сведения об авторах

Гончаров Иннокентий Александрович, асп., Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова (МГУ), 119991, Москва, ГСП-1, Ленинские горы, д. 1; e-mail: rtif91@gmail.com

Белякова Татьяна Александровна, кфмн., доц., МГУ; e-mail: tanbel2@yandex.ru